EFECTO DEL CAMPO MAGNÉTICO SOBRE EL ESPECTRO DE UNA IMPUREZA D^0 EN DISCOS CUÁNTICOS BIDIMENSIONALES DE InAs/GaAs VERTICALMENTE ACOPLADOS

FREDY ANTONIO RODRÍGUEZ PRADA

UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER
FACULTAD DE CIENCIAS
ESCUELA DE FÍSICA
2006

EFECTO DEL CAMPO MAGNÉTICO SOBRE EL ESPECTRO DE UNA IMPUREZA D^0 EN DISCOS CUÁNTICOS BIDIMENSIONALES VERTICALMENTE ACOPLADOS

Trabajo de Grado como requisito para optar el título de Físico:

FREDY ANTONIO RODRÍGUEZ PRADA

Director:

Dr. CARLOS LEONARDO BELTRÁN RÍOS

Codirector:

Dr. HAROLD PAREDES GUTIÉRREZ

UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER
FACULTAD DE CIENCIAS
ESCUELA DE FÍSICA

2006

Con gran orgullo dedico este proyecto:
A mis padres
Ana Nubia Prada Suárez
Rodolfo Rodríguez Hernández.
A mis hermanas
...A toda mi familia.

AGRADECIMIENTOS

Agradezco a las personas quienes en gran o menor medida contribuyeron a dar forma a este trabajo, agradezco principalmente a mis padres y a mis hermanas por su incondicional apoyo.

A la Escuela de Física de la Universidad Industrial de Santander.

A los profesores Carlos Leonardo Beltrán Ríos y Harold Paredes Gutiérrez por la dirección y co-dirección de este proyecto de investigación y por sus aportes al mismo.

Al Doctor Ilia Davidovich Mikhailov por compartir conmigo sus ingeniosas ideas y por ser un gran tutor en el área de la programación.

A los compañeros de investigación del grupo FICOMACO, William Amado, Carlos Gómez, Eduardo Galván, Hamilton Carrillo, Oscar Acevedo, Juan C. Piña, William Gutiérrez, Jairo Marin, Francisco Garcia Russi y Jhon Lozada.

A los profesores Carlos Ramírez y Javier Betancurt.

Y por ultimo a los amigos, compañeros y demás que alguna u otra vez me apoyaron, divirtieron e incluso molestaron durante la realización de este proyecto.

...DANKE.

TÍTULO : EFECTO DEL CAMPO MAGNÉTICO SOBRE UNA IMPUREZA D^0 EN DISCOS CUÁNTICOS BIDIMENSIONALES DE InAs/GaAs VERTICALMENTE ACOPLADOS *.

AUTOR : Rodríguez Prada, Fredy Antonio **.

PALABRAS CLAVES : Impureza Donadora, Espectro energético, Energía de enlace, Barrido Trigonométrico.

RESUMEN : En este trabajo se reportan los resultados obtenidos para el espectro energético de una impureza donadora neutra localizada en un sistema ideal de bicapas paralelas con confinamiento radial. La impureza donadora y su electrón están separados espacialmente en capas diferentes y se encuentran sometidos a la acción de un campo magnético uniforme, aplicado en dirección perpendicular al plano de las bicapas.
La solución de la ecuación de Schrödinger asociada al sistema se realizó mediante la utilización del método de barrido trigonométrico, y los resultados que se reportan se obtuvieron mediante cálculos numéricos elaborados en lenguaje FORTRAN.
Como verificación del método utilizado, se calculó la energía de los tres primeros estados electrónicos de la impureza donadora en función de la distancia de separación entre las bicapas sin confinamiento radial, encontrándose que para cuando esta distancia de separación tiende a cero, la energía de la impureza tiende al límite del átomo de Hidrógeno bidimensional.
Se obtuvo la energía de la impureza y su energía de enlace considerando un confinamiento radial en las bicapas y se presenta el comportamiento de esta energía respecto a parámetros tales como la distancia de separación entre las bicapas y el radio de confinamiento.
Por ultimo se presenta y se analiza el efecto del campo magnético sobre el espectro energético de la impureza donadora y sobre la energía de enlace de la misma en comparación con los parámetros geométricos del sistema como la distancia de separación entre las bicapas y el radio de confinamiento.

*Proyecto de Grado

**Facultad de Ciencias, Escuela de Física, Carlos Leonardo Beltrán Ríos (Director), Harold Paredes Gutiérrez (Codirector)

TITLE : MAGNETIC-FIELD EFFECTS ON D^0 DONOR IMPURITY LOCATED IN InAs/GaAs BIDIMENSIONAL QUANTUM DISK VERTICALLY COUPLED *.

AUTHORS : Rodríguez Prada, Fredy Antonio **.

KEY WORDS : Donor Impurity, Energy spectrum, Binding energy, Trigonometric sweep.

DESCRIPTION : In this work it´s reported the results obtained for the energy spectrum of a neutral donor impurity located in an ideal system of parallel bilayers with radial confinement. The impurity and your electron are located in different layers and are under the action of a magnetic field uniform, applied in perpendicular direction of the plane of the bilayers.
The solution of the Schrödinger equation associated to the system was made using the trigonometric sweep method, and the result reported was obtained by means of numerical calculations in FORTRAN language.
As verification of the used method, it's calculated the energy of the three first electronic states of the donor impurity in function of the separation distance between the bilayers without radial confinement, being that for when this separation distance tends to zero, the energy of the impurity tends to the limit of the bidimensional Hydrogen atom.
The energy of the impurity was obtained and its binding energy considering a radial confinement in the bilayers, and it's presented the behavior of this energy with respect to parameters such as the separation distance between the bilayers and confinement radii.
Finalizing this work, it´s presented and it´s analyzed the effect of the magnetic field on the energy spectrum of the donor impurity and on the binding energy of the same one in comparison with the geometric parameters of the system like the separation distance between the bilayers and the confinement radii.

*Senior thesis project.

**Facultad de Ciencias, Escuela de Física, Carlos Leonardo Beltrán Ríos (Director),Harold Paredes Gutiérrez (Codirector)

NOTACIÓN

En el presente trabajo se ha utilizado la adimensionalidad de las unidades efectivas para efectos de programación. En la posterior conversión de unidades se elegido como unidad de longitud: Nanómetros (nm), como unidad de energía: Milielectronvoltios (meV) y el campo magnético se expresa en Teslas (T).
A continuación se dará una lista con la notación empleada y mencionada en el desarrollo del trabajo para los parámetros utilizados:

AME	:	*Aproximación de masa efectiva*
D^0	:	*Impureza donadora neutra*
m^*	:	*Masa efectiva del electrón*
$\overrightarrow{p}$	:	*Momento Lineal*
ϵ	:	*Constante dieléctrica del material*
τ	:	*Parámetro de la interacción Coulombiana*
a_0^*	:	*Radio de Bohr efectivo*
Ry^*	:	*Rydberg efectivo*
γ	:	*Factor de Landau*
g^*	:	*Factor efectivo de Lande del electrón*
B	:	*Campo magnético*
μ_B	:	*Magnetón de Bohr*
$\overrightarrow{A}$	:	*Potencial vector*
V_ρ	:	*Potencial de confinamiento radial*
Δ	:	*Laplaciano*

ÍNDICE GENERAL

INTRODUCCIÓN **1**

1. GENERALIDADES **6**

1.1. Sistemas cuánticos de baja dimensionalidad 6

1.2. Impurezas donadoras en semiconductores 7

1.3. Modelo De Confinamiento 8

2. FORMULACIÓN DEL PROBLEMA **10**

3. MODELO TEÓRICO **12**

3.1. Aproximación de masa efectiva-AME 12

3.2. Parámetros efectivos para InAs/GaAs 13

3.3. Hamiltoniano para la impureza en unidades unidades efectivas 14

3.4. Ecuación de Schrödinger para el sistema 17

4. MÉTODO DE BARRIDO TRIGONOMÉTRICO PARA EL SISTEMA **19**

4.1. Planteamiento 19

4.2. Aplicación de Barrido trigonométrico 21

5. ESPECTRO ENERGÉTICO 23

5.1. NIVELES ENERGÉTICOS: 23

5.2. Efecto de la distancia sobre la energía del sistema. 25

5.3. Energía de la D^0 en función del radio de confinamiento. 27

6. ENERGÍA DE ENLACE: E_b 31

6.1. Energía de enlace de la D^0 en función de d 31

6.2. Energía de enlace de la D^0 en función de R_0 33

7. EFECTO DEL CAMPO MAGNÉTICO 36

7.1. Energía de la donadora en función del campo magnético 37

8. ENERGÍA DE ENLACE: REPRESENTACIÓN 3-D 42

CONCLUSIONES 43

APÉNDICE 44

REFERENCIAS 48

ÍNDICE DE FIGURAS

1.1. *Crecimiento de Stranski Krastanov* 6

1.2. *Impureza Donadora* D^0 7

1.3. *Formación de discos en bicapas paralelas* 8

1.4. *Donadora* D^0 *en discos cuánticos acoplados verticalmente en presencia de un campo magnético* 9

2.1. *Modelo considerado para la impureza* D^0 10

5.1. *Energía de la* D^0 *en el estado* $1s, 1p$ y $1d$ *en función de la distancia enter bicapas.* 25

5.2. *Energía de la* D^0 *en los estados* $1s$, $1p$, $1d$ *en función de la distancia.* 27

5.3. *Energía de la donadora en función del radio de confinamiento, para distancias entre bicapas de*: $d = 0{,}5\, a_0^*$, $d = 2\, a_0^*$ y $d = 10\, a_0^*$. 28

5.4. *Energía de la donadora para los estados* **1s**, **2s** y **3s**, *en función del radio de confinamiento, para distancias entre bicapas* $d = 0{,}5\, a_0^*$ *y* $d = 10\, a_0^*$. 29

5.5. *Energía de la donadora y el electrón libre, para los estados* $1s$ y $1p$ *en función del radio de confinamiento, para una distancia entre bicapas* $d = 4{,}0\, a_0^*$. . . 30

5.6. *Energía de la donadora y el electrón libre para los estados* $1s$ y $1p$ *como función del radio de confinamiento para una distancia entre las bicapas,* $d = 2{,}0\, a_0^*$. . 30

6.1. *Energía de enlace de la D^0 en el estado $1s$, $1p$ y $1d$ en función de la distancia.* 32

6.2. *Energía de enlace de la D^0 en el estado $1s$ en función del radio R_0, para diferentes distancias d.* 33

6.3. *Energía de enlace de la D^0 en el estado $1s$ y $1p$ en función del radio R_0, para $d = 2a_0^*$.* 35

7.1. *Energía de la D^0 en función del campo magnético B, para los estados 1s, 1p, 1d, 2s, 2p, 2d para $R_0 = 3\,a_0^*$ y $d = 1\,a_0^*$.* 38

7.2. *Energía de la D^0 en función del campo magnético B, para los estados 1s, 1p, 1d, 2s, 2p, 2d para $R_0 = 3\,a_0^*$ y $d = 4\,a_0^*$.* 38

7.3. *Energía de la D^0 en el estado $1s$ en función de d, para diferentes valores del campo magnético y el radio R_0.* 39

7.4. *Energía de enlace de la D^0 en el estado $1s$ en función de R_0, para $B = 5\,T$ y $B = 20\,T$ a distancias $d = 1\,a_0^*$ y $d = 4\,a_0^*$.* 40

8.1. *Energía de enlace de la D^0 en el estado $1s$ en función de R_0 y d, para $B = 0T$* 42

ÍNDICE DE TABLAS

5.1. *Nomenclatura para los niveles electrónicos* 23

5.2. *Niveles energéticos. Izquierda*: ($d = 1a_0^*$); *Derecha* ($d = 4a_0^*$). *Con* $R_0 = 3\,a_0^*$. 24

6.1. *Energía para el electrón libre, con* $R_0 = 2{,}5a_0*$ 32

7.1. *Estados energéticos para diferentes valores del campo magnético* B, *con* $R_0 = 3\,a_0^*$ *y* $d = 1\,a_0^*$. 36

7.2. *Estados energéticos para diferentes valores del campo magnético* B, *con* $R_0 = 3\,a_0^*$ *y* $d = 4\,a_0^*$. 37

INTRODUCCIÓN

Recientemente, las investigaciones en el campo de la materia condensada se han venido enfocando en el estudio de estructuras fabricadas mediante diferentes técnicas de crecimiento de cristales, como en el caso de los materiales semiconductores. El principal interés de los investigadores radica en el comportamiento de los portadores de carga en las llamadas heteroestructuras de baja dimensionalidad, ya que éstas constituyen sistemas cuánticos con importantes propiedades electrónicas y opto-electrónicas, aplicables en la creación y miniaturización de materiales y dispositivos a escala nanométrica, a partir de ello se ha originado un campo de interés científico denominado Nanotecnología.
Los procesos de fabricación de estas estructuras se basan en una variedad de técnicas de crecimiento de cristales, en las que se incluyen métodos tales como Litografía con base en rayos electrónicos e interdifusión a través de impurezas en la estructura cristalina [1], Deposición molecular epitaxial (MBE); Deposición química metal-orgánica en la fase de vapor (MOCVD) [2] y epitaxia por fase liquida [3]. Estas técnicas permiten fabricar estructuras que tengan un confinamiento cuántico en todas sus direcciones, lo que conduce a confinar los portadores en regiones muy pequeñas.
Las estructuras más estudiadas, fabricadas a partir de técnicas como las mencionadas anteriormente [1, 3], son los llamadas pozos (QW's), multiples pozos (MQW's), hilos (QWW's), anillos (QR's), super-redes (SL's) y puntos cuánticos(QD´s), estos últimos con geometrías diversas tales como discos, lentes y pirámides [4].

Las estructuras de principal importancia en esta rama de los sistemas cuánticos de baja dimensionalidad, son los llamados QD's. Un QD es esencialmente la formación de una pequeña isla de un material semiconductor, crecida sobre un bloque de otro material semiconductor con mayor brecha entre las bandas de valencia y de conducción. La diferencia que existe entre las brechas de energía en la juntura provoca saltos de potencial, que confinan a los portadores de carga que pueden habitar en estos puntos cuánticos. Estos portadores de carga pueden ser electrones y/o huecos.

Últimamente, el interés se orienta hacia los QD's auto-ensamblados (SAQD's) y hacia los QD´s acoplados (CQD's), tales estructuras poseen mejores propiedades cuánticas aplicables a dispositivos opto-electrónicos a escala nanométrica. Estas estructuras ensambladas son formadas por métodos de crecimiento de cristales, como el de Stranski-Krastanov [5], basados en la deposición de un material sobre un substrato con parámetro de red diferente, sobre el cual se crecen las pequeñas islas de material semiconductor dando lugar al punto.

En este trabajo se estudia una estructura compuesta por dos puntos cuánticos de geometría cilíndrica, ubicados en capas paralelas. Estas estructuras semiconductoras son denominadas en la literatura como sistemas de bicapas, cuando tiene un espesor despreciable, o puntos cuánticos acoplados verticalmente, para cuando no se desprecia tal espesor. Heteroestructuras de este tipo se forman experimentalmente por la técnica de Stranski Krastanov [5] utilizando materiales semiconductores tales como $InAs$ y $GaAs$: los puntos cuánticos de $InAs$ se crecen sobre un substrato de $GaAs$. Este tipo de estructuras han sido de gran interés desde el punto de vista físico, tanto teórico como experimental, en donde se analiza el comportamiento de portadores de carga confinados en tales sistemas. Lixin *et. al.* [6] estudiaron este tipo de estructuras para escalas moleculares, en donde los puntos cuánticos reciben el nombre de "puntos cuánticos moleculares (MQD´s)" o átomos artificiales con dimensiones del orden de 1 a 100nm. y conteniendo entre 2 y 200 núcleos atómicos en su estructura cristalina.

Los portadores de carga se confinan en estas estructuras restringiendo su movimiento sólo en algunas direcciones, dependiendo de la dimensionalidad de la estructura en cuestión. Para el sistema planteado en este trabajo, los portadores de carga son confinados radialmente en las bicapas. Se puede modelar esta estructura como discos cuánticos bidimensionales acoplados verticalmente, en donde la impureza donadora y su electrón se localizan en discos diferentes.

Respecto a los trabajos hechos sobre impurezas donadoras en sistemas cuánticos de baja dimensionalidad, fue Bastard [7] quien primero trató teóricamente una impureza hidrógenoide en un pozo cuántico con paredes de potencial infinitas, en la aproximación de masa efectiva (AME). Posteriormente se realizaron trabajos donde se calcula los niveles de energía de impurezas donadoras hidrógenoides neutras, en QD's esféricos [8] y rectangulares [9].

El grupo de investigación FICOMACO (Física computacional en materia condensada), de la Escuela de Física de la Universidad Industrial de Santander, ha realizado recientemente trabajos teóricos en los que se estudia los estados electrónicos de impurezas donadoras en QD´s [10] y en heteroestructuras en presencia de campos magnéticos [11].

Las impurezas donadoras confinadas en heteroestructuras han sido objeto de mayor atención, tanto desde el punto de vista teórico como experimental; analizando el efecto de un campo magnético externo sobre el espectro energético y las funciones de onda de los estados electrónicos. Varios de los estudios teóricos fueron enfocados para pro-

poner cálculos sobre la energía de enlace de una D^0 en puntos cuánticos con forma de disco, con la impureza localizada en el eje del mismo [12], bajo la acción de un campo magnético aplicado en dirección paralela al eje.
Los estudios teóricos respecto a la energía de impurezas donadoras en tales sistemas, han sido tratados mediante la utilización de diversos métodos de cálculo tales como: variacional [8], [12, 15], expansión en series [16], perturbaciones [17], dimensional fraccional [18], barrido trigonométrico [19] y el método de Montecarlo [20], obteniéndose resultados con muy buenas aproximaciones.
En este trabajo, se hace uso del método de barrido trigonométrico para calcular el espectro de energías de una impureza donadora neutra en bicapas paralelas, en presencia de un campo magnético uniforme paralelo al eje de las mismas.
En los trabajos mencionados, se tiene en consideración los efectos del campo magnético sobre el espectro energético de las impurezas donadoras; ya que se altera en forma considerable las densidades de los estados del sistema, debido a los efectos de confinamiento adicionales sobre los portadores de carga.
El aspecto más importante de la solución de la ecuación de Schrödinger para un sistema, en presencia de un campo magnético, es el obtener su espectro de energía. Cuando un electrón se somete a un campo magnético la expresión para la ecuación de Schrödinger, toma la forma del oscilador armónico bidimensional, y la función de onda propia se da en términos de los polinomios de Laguerre. Respecto a los niveles energéticos del sistema, éstos son los correspondientes niveles de Landau; dichos niveles son degenerados [21].
En cuanto a los portadores de carga en sistemas de bicapas paralelas los aportes, más significativos, reportados hasta el momento han sido sobre excitones confinados en estos sistemas, en ausencia de campos externos. M. Y. J. Tan et al.[22] calcularon la energía de enlace para el estado base de un exciton, de un biexciton y la energía para el par electrón-hueco, como una función de la distancia entre las bicapas, sin campo magnético aplicado. Para el excitón, los portadores están en capas diferentes y no tiene confinamiento en la dirección radial. Ellos reportan que al disminuir la distancia entre las bicapas el sistema se asemeja a un átomo de hidrógeno bidimensional, con un valor de la energía de -4.0Ry.
En el presente trabajo se hace un análisis del trabajo de M. Y. J. Tan et al.[22] y se estudia el caso de una impureza D^0, con la impureza y el electrón en capas diferente, para cuando la distancia entre las bicapas tiende a cero, límite en el cual se tiene un modelo del átomo de hidrógeno bidimensional en el estado base. Se considera un confinamiento en el plano de las bicapas y en presencia de un campo magnético uniforme perpendicular a las mismas.

1

GENERALIDADES

1.1 Sistemas cuánticos de baja dimensionalidad

Los sistemas cuánticos de baja dimensionalidad denominados heteroestructuras semiconductoras se generalizan en una amplia diversidad de esquemas las cuales se crean mediante procesos de crecimiento de semiconductores. Algunas estructuras como puntos cuánticos auto-ensamblados son crecidos mediante la técnica de Stranski Krastanov. Esta técnica consiste en la deposición de una capa de un material semiconductor de ancho igual a una molécula sobre un substrato de otro material semiconductor con parámetro de red diferente; con esta diferencia en sus parámetros de red se producen tensiones en la superficie de los dos materiales, provocando el surgimiento de islas en las tres dimensiones sobre una delgada capa denominada "capa húmeda".Este efecto se presenta consecutivamente de forma lateral sobre el substrato generando los SAQD's.

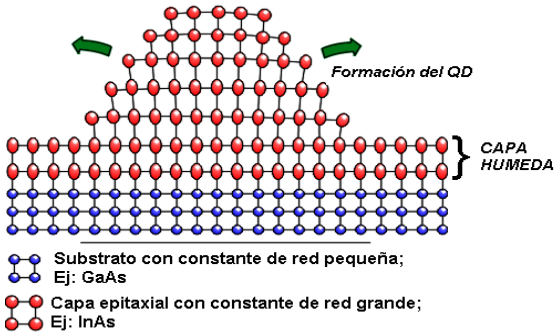

figura 1.1: *Crecimiento de Stranski Krastanov*

Los portadores de carga se confinan en estas estructuras restringiendo su movimiento sólo en algunas direcciones, dependiendo de la dimensionalidad de la estructura. Estos portadores pueden ser electrones, excitones e impurezas donadoras neutras D^0 como negativas D^-.
Una profundización sobre algunos portadores de carga como son las impurezas en estructuras semiconductoras se expone en la siguiente sección.

1.2 Impurezas donadoras en semiconductores

Una impureza es un átomo que se introduce a la red ocupando sitios de la red que normalmente estarían ocupados por átomos del semiconductor, átomo que forma enlaces con los átomos circunvecinos dejando un electrón de valencia interactuando débilmente con él, que se encuentra inmóvil, en vista de que está fuertemente unido a cuatro átomos vecinos.

Por ejemplo substancias tales como arsénico, antimonio u otros elementos pertenecientes al grupo V de la tabla periódica, en cristales puros de silicio o germanio, como impurezas de substitución, los átomos del grupo V tienen cinco electrones de valencia. Cuatro de ellos se usan para formar enlaces covalentes con átomos circunvecinos del semiconductor y el quinto se enlaza al átomo de impureza solo mediante fuerzas electrostáticas que son muy débiles, por eso se puede ionizar con facilidad mediante la agitación térmica de la red a temperaturas ordinarias para proporcionar una conducción electrónica *adicional*. Entonces, el átomo de impureza que queda se convierte en un ion positivo, que, sin embargo, es inmóvil, en vista de que está fuertemente unido a cuatro átomos vecinos por medio de los enlaces covalentes normales. En cristales que contienen este tipo de

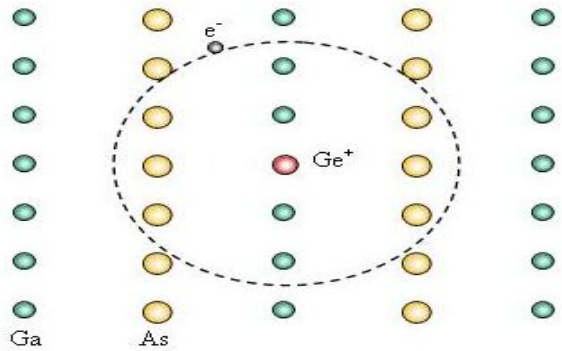

figura 1.2: *Impureza Donadora* D^0

impurezas existen más electrones que huecos (aunque algunos huecos siguen estando presentes debido a los pares hueco-electron que se siguen creando térmicamente de vez en cuando). Estas impurezas reciben el nombre de donadoras, D^0. y los cristales de este tipo se denominan semiconductores tipo n, designados así porque la mayoría de los portadores de carga son electrones negativos.

1.3 Modelo De Confinamiento

Como objeto de estudio se ha tomado un sistema de bicapas de formación de puntos cuánticos de *InAs* sobre un substrato de *GaAS*, estas heteroestructuras son formadas mediante procesos epitaxiales de crecimiento de cristales, como la técnica de Stranski Krastanov explicada en el primer capitulo.

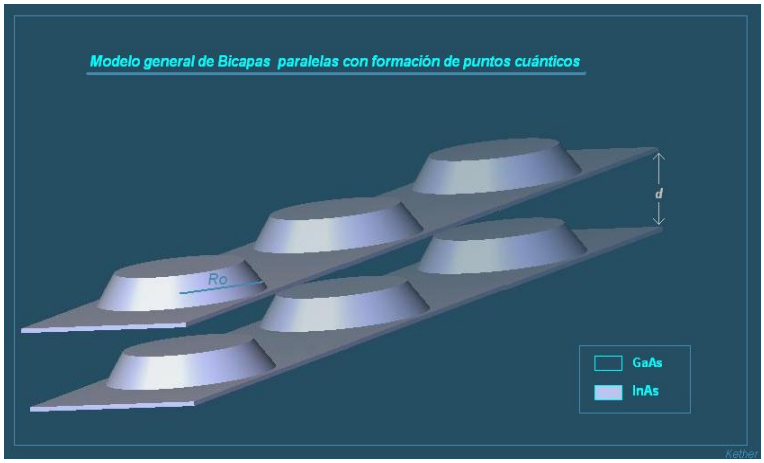

figura 1.3: *Formación de discos en bicapas paralelas*

Esquemáticamente en este modelo se estudia el espectro energético de una impureza donadora D^0 confinada en este sistema de discos cuánticos acoplados verticalmente (VCQD's) en presencia de un campo magnético aplicado en dirección transversal a los mismos.

En este modelo la impureza donadora se encuentra localizada en uno de los discos cuánticos y su electron se encuentra en el otro, con una distancia de separación entre discos constante, Como se muestra en el siguiente esquema:

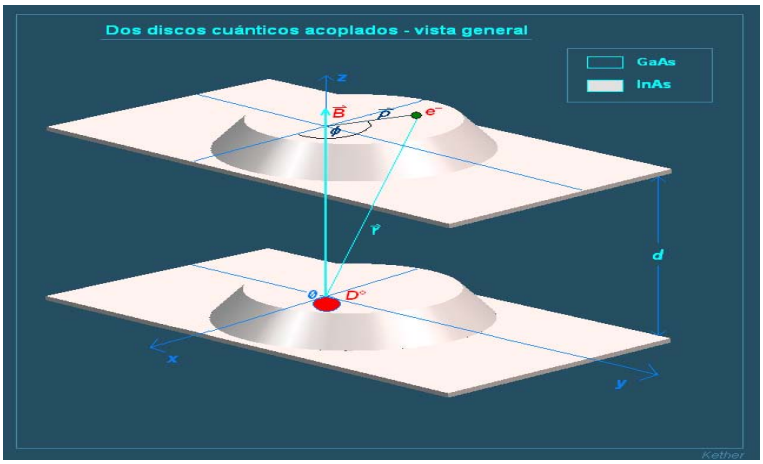

figura 1.4: *Donadora D^0 en discos cuánticos acoplados verticalmente en presencia de un campo magnético*

El confinamiento para el sistema que se analiza en el presente trabajo, es de tipo radial, y el potencial que lo describe viene dado por la siguiente expresión:

$$V_\rho(\rho) = \begin{cases} 0 & ,\text{si } \rho < R_0 \\ V_0 & ,\text{si } \rho > R_0 \end{cases}$$

En donde, ρ es la coordenada radial del sistema y R_0 es el radio de los discos cuánticos. El valor de este potencial de confinamiento esta aproximadamente entre $40Ry^*$ y $50Ry^*$ [10] para este tipo de heteroestructuras, en los cálculos realizados mediante relaciones empíricas se obtuvo un valor $V_0 \approx 43Ry^*$, valor utilizado en este trabajo.

2

FORMULACIÓN DEL PROBLEMA

En este proyecto se ha hecho una idealización del modelo de confinamiento mostrado en la figura 1.4, es decir, se hizo un primer modelo para el estudio de una D^0 confinada en un sistema de bicapas paralelas en presencia de un campo magnético, con la impureza localizada en una de las bicapas y su electrón en la otra. La formulación de este modelo en la que se ha despreciado el grosor de la bicapa es como la que se muestra en la siguiente figura:

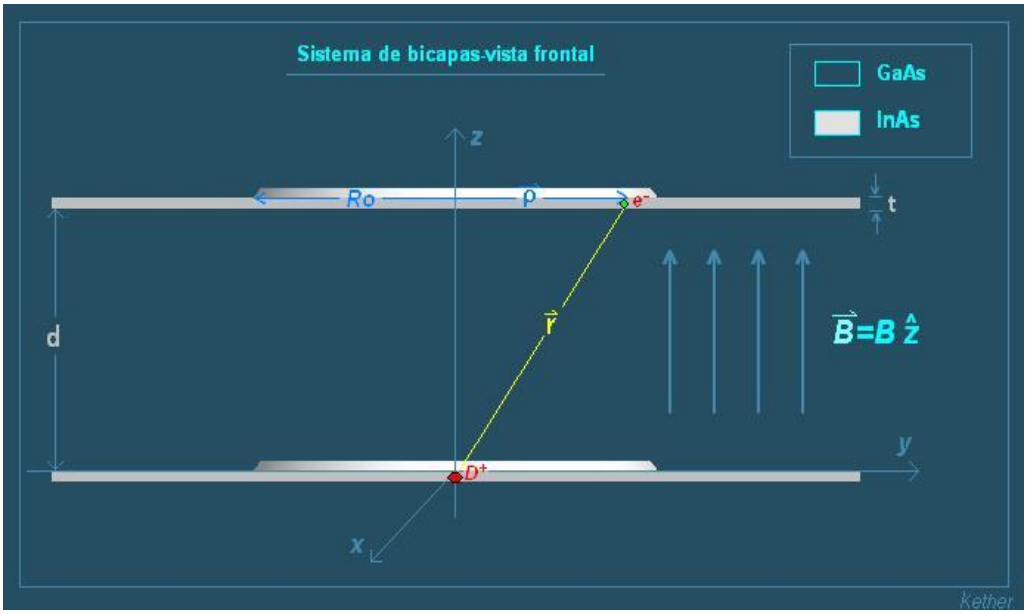

figura 2.1: *Modelo considerado para la impureza* D^0

El eje de referencia para el sistema se ubico sobre la impureza D^0, es decir, en la bicapa inferior y el radio de confinamiento se tomo de igual magnitud para las dos capas. El campo magnético es uniforme y se aplica en la dirección perpendicular al plano de las bicapas.
En base a la anterior formulación del problema se realizaron los respectivos cálculos y análisis de resultados, resultados que se muestran en los capítulos 5 - 8.

3

MODELO TEÓRICO

3.1 Aproximación de masa efectiva-AME

Los estados ligados de los electrones de una impureza en un semiconductor masivo pueden tratarse de manera simplificada mediante la aproximación de masa efectiva, el problema es análogo al del átomo de hidrógeno, pero reemplazando la masa del electrón libre y la constante dieléctrica del vacío por la masa efectiva del electrón y la constante dieléctrica del semiconductor, respectivamente.

La **AME** consiste en reemplazar el potencial cristalino del semiconductor, por un potencial constante V acorde al sistema cuántico que se esté analizando (SAQD's). El potencial es $V = 0$ dentro del SAQD, es decir, en el fondo de la banda de conducción del material interno del QD y $V = V_0$ por fuera de él ó lo que es lo mismo, en las bandas de conducción de los materiales que rodean al QD. Posteriormente se sustituye la masa del electrón libre por una masa efectiva m^* que contrarreste el efecto de la sustitución del potencial cristalino del semiconductor. En este trabajo se utiliza como material principal de las bicapas al $InAs$ rodeadas de $GaAs$. Estos materiales tienen la gran ventaja de que su estructura de bandas es aproximadamente parabólica, por lo que la masa efectiva de los electrones en él es aproximadamente isotrópica e independiente de la energía, razón por la cual se toma como constante en toda la estructura, al igual que la constante dieléctrica del material.

3.2 Parámetros efectivos para InAs/GaAs

El planteamiento teórico para una impureza donadora neutra en puntos cuánticos de InAs/GaAs se ha hecho bajo la aproximación de masa efectiva, aproximación utilizada por primera vez en el trabajo de Bastard para el estudio de una donadora en un pozo cuántico [7].

Los parámetros efectivos que se utilizan en este trabajo son los correspondientes a $InAs/GaAs$:

- $\mathbf{m}^* = 0{,}023\mathbf{m_0}$: Masa Efectiva para el electrón en InAs donde $\mathbf{m_0}$ es la masa para el electrón libre.
- $\mathbf{m}^* = 0{,}0665\mathbf{m_0}$: Masa Efectiva para el electrón en GaAs donde $\mathbf{m_0}$ es la masa para el electrón libre.
- $\epsilon = 15{,}2$: Permitividad eléctrica en InAs
- $\epsilon = 12{,}5$: Permitividad eléctrica en GaAs
- Radio de Bohr efectivo

$$a_0^* = \frac{\epsilon\hbar}{m^* e^2} \tag{3.1}$$

- Rydberg efectivo

$$\frac{\hbar^2}{2m^* a_0^{*2}} = \frac{e^2}{2(4\pi\epsilon_0)\epsilon a_0^*} = Ry^* \tag{3.2}$$

Los anteriores valores para la masa efectiva y la constante dieléctrica en $InAs$ y $GaAs$ se toman de el trabajo hecho por M. Grundmann *et al* [23], en el cálculo de la distribución de tensión dentro y fuera de un un QD de InAs/GaAs con forma piramidal, y la energía para electrones y huecos confinados en estas estructuras como una función de la base del QD. Los parámetros de Radio de Bohr efectivo (a_0^*) y Rydberg efectivo (Ry^*), se utilizan como unidades de longitud y de energía respectivamente para expresar el hamiltoniano del sistema en unidades adimensionales. Los valores calculados de estas unidades fueron, $a_0^* = 9,84\,nm.$ en $GaAs$ y $a_0^* = 35,04\,nm.$ en $InAs$ para el radio de Bohr efectivo y para el Rydberg efectivo $Ry^* = 5,83\,meV$ en $GaAs$ y $Ry^* = 1,35\,meV$ en $InAs$.
El uso de las unidades efectivas tiene sus ventajas, pues permiten liberar al Hamiltoniano de todo tipo de constantes, lo cual se hace conveniente en la respectiva programación.

3.3 Hamiltoniano para la impureza en unidades unidades efectivas

La expresión del Hamiltoniano para una impureza donadora en presencia de un campo magnético para el sistema de bicapas, tal como se ilustra en la figura 2, esta dado por

$$H = \frac{1}{2m^*}\left[\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}\right]^2 + V_c(\rho) + V_\rho(\rho). \tag{3.3}$$

En donde,

$$V_\rho(\rho) = \begin{cases} 0 & ,\text{si } \rho < R_0 \\ V_0 & ,\text{si } \rho > R_0 \end{cases},$$

y

$$V_c(\rho) = \frac{e^2\tau}{4\pi\epsilon_0\epsilon\sqrt{\rho^2 + d^2}} \tag{3.4}$$

Con $\tau = 0$ para el electrón libre y $\tau = -1$, para la interacción del electrón con la donadora D^0; teniendo una separación entre bicapas $\boldsymbol{d}$.

El Hamiltoniano 3.3 se puede expresar haciendo uso del operador de momentum, $\vec{p} = -i\hbar\nabla$, de la siguiente forma

$$H = \frac{1}{2m^*}\left[-\hbar^2\nabla^2 - i\hbar\frac{e}{c}\vec{A}\cdot\nabla - i\hbar\frac{e}{c}\nabla\cdot\vec{A} + \left(\frac{e}{c}\right)^2\vec{A}^{\,2}\right] + V_c(\rho) + V_\rho(\rho) \tag{3.5}$$

Utilizando la propiedad: $\nabla\cdot(\vec{A}\,\psi) = \vec{A}\cdot\nabla\psi + (\nabla\cdot\vec{A})\psi$, y haciendo uso del gauge de Coulomb $\nabla\cdot\vec{A} = 0$, se obtiene:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m^*}\nabla^2 - \frac{i\hbar e}{m^*c}\vec{A}\cdot\nabla + \frac{e^2}{2m^*c^2}\vec{A}^{\,2} + V_c(\rho) + V_\rho(\rho) \tag{3.6}$$

El potencial vector $\vec{A}$ se asume de la forma $\vec{A} = \frac{1}{2}(\vec{B} \times \vec{r})$, con el campo magnético orientado en la dirección $\boldsymbol{z}$. El hamiltoniano inicial puede expresarse entonces en coordenadas cilíndricas debido a que el sistema presenta esta geometría, con $A_\rho = A_z = 0$; $A_\varphi = \frac{1}{2}\rho B$ y $\vec{B} = B\hat{z}$.

Teniendo en cuenta los anteriores parámetros, se encuentra a partir de cálculos sencillos, que el hamiltoniano 3.5 toma la forma:

$$H = \frac{1}{2m^*}\left[-\hbar^2\Delta_{\rho,\varphi} - \frac{e}{c}BL_z + \frac{1}{4}\left(\frac{e}{c}\right)^2\rho^2B^2\right] + V_c(\rho) + V_\rho(\rho) \tag{3.7}$$

En donde $L_z = \pm i\hbar\dfrac{\partial}{\partial\varphi}$ es la componente $\hat{z}$ del momento angular del electrón, y $\Delta_{\rho,\varphi} = \nabla^2_{\rho,\varphi}$ es el Laplaciano en las coordenadas ρ y φ. Reemplazando este Laplaciano en la anterior ecuación, se obtiene la ecuación diferencial en ρ y φ,

$$\begin{aligned} H_{\rho\varphi} = &-\frac{\hbar^2}{2m^*}\left[\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\left(\rho\frac{\partial}{\partial\rho}\right) + \frac{1}{\rho^2}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right] - \frac{eB\hbar}{2m^*c}\left(\pm i\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) \\ &+ \frac{e^2B^2}{8m^*c^2}\rho^2 + V_\rho(\rho) + V_c(\rho) \end{aligned} \tag{3.8}$$

Aplicando el cambio de variable $\rho = a_0^*\tilde{\rho}$, siendo a_0^* el radio de Bohr efectivo; el hamiltoniano toma la forma:

$$\begin{aligned} H_{\tilde{\rho}\varphi} = &-\frac{\hbar^2}{2m^*(a_0^*)^2}\left[\frac{1}{\tilde{\rho}}\frac{\partial}{\partial\tilde{\rho}}\left(\tilde{\rho}\frac{\partial}{\partial\tilde{\rho}}\right) + \frac{1}{\tilde{\rho}^2}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right] - \frac{eB\hbar}{2m^*c(a_0^*)^2}\left(\pm i\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) \\ &+ \frac{e^2B^2(a_0^*)^2}{8m^*c^2}\tilde{\rho}^2 + V_c(\tilde{\rho}) + V_{\tilde{\rho}}(\tilde{\rho}). \end{aligned} \tag{3.9}$$

Con,

$$V_{\tilde{\rho}}(\tilde{\rho}) = \begin{cases} 0 & ,\text{si } \tilde{\rho} < R_0/a_0^* \\ V_0 & ,\text{si } \tilde{\rho} > R_0/a_0^* \end{cases},$$

y

$$V_c(\tilde{\rho}) = \frac{e^2\tau}{4\pi\epsilon_0\epsilon a_0^*\sqrt{\tilde{\rho}^2+\tilde{d}^2}}; \qquad d = a_0^*\tilde{d} \tag{3.10}$$

Haciendo uso de las unidades de longitud y de energía 3.1, 3.2 respectivamente, se simplifica el Hamiltoniano 3.9, obteniéndose:

$$\begin{aligned} H_{\tilde{\rho}\varphi} = -Ry^*\left[\frac{1}{\tilde{\rho}}\frac{\partial}{\partial\tilde{\rho}}\left(\tilde{\rho}\frac{\partial}{\partial\tilde{\rho}}\right)+\frac{1}{\tilde{\rho}^2}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right] - \frac{eB(a_0^*)^2}{\hbar c}Ry^*\left(\pm i\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) \\ + \frac{1}{4}\left(\frac{eB(a_0^*)^2}{\hbar c}\right)^2 Ry^*\tilde{\rho}^2 + \frac{2\tau Ry^*}{\sqrt{\tilde{\rho}^2+\tilde{d}^2}} + Ry^*V_{\tilde{\rho}}(\tilde{\rho}). \end{aligned} \tag{3.11}$$

Si dividimos esta expresión por el Rydberg efectivo (Ry^*) y además, introducimos el factor de Landau γ, el Hamiltoniano queda totalmente adimensional,

$$\tilde{H}_{\tilde{\rho}\varphi} = -\left[\frac{1}{\tilde{\rho}}\frac{\partial}{\partial\tilde{\rho}}\left(\tilde{\rho}\frac{\partial}{\partial\tilde{\rho}}\right)+\frac{1}{\tilde{\rho}^2}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right] - \gamma\left(\pm i\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) + \frac{1}{4}\gamma^2\tilde{\rho}^2 + \frac{2\tau}{\sqrt{\tilde{\rho}^2+\tilde{d}^2}} + \tilde{V}_{\tilde{\rho}}(\tilde{\rho}) \tag{3.12}$$

En donde el potencial de confinamiento también se ha hecho adimensioanl mediante la sustitución $V_\rho(\rho) = Ry^*\tilde{V}_{\tilde{\rho}}(\tilde{\rho})$. El término γ es adimensional y corresponde a la energía del electrón, en el primer nivel de Landau ($n = 0$) bajo la acción de un campo magnético $\boldsymbol{B}$, este término adimensional viene dado por

$$\gamma = \frac{eB(a_0^*)^2}{\hbar c} = \frac{e\hbar B}{2m^*cRy^*}. \tag{3.13}$$

En el anterior planteamiento no se ha tenido en cuenta el término relacionado con el Spin del electrón. *W.Xie* y *P. Sun* [24] consideran este término en su modelo teórico para tres electrones interactuando en QD´s acoplados verticalmente bajo la acción de un campo magnético aplicado en la dirección de crecimiento de la heteroestructura. Agregando este término en el Hamiltoniano 3.3, se tiene que,

$$H = \frac{1}{2m^*}\left[\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}\right]^2 + g^*\mu_B B S_z + V_c(\rho) + V_\rho(\rho) \tag{3.14}$$

En donde $g^* = -0{,}44$, es el factor de Lande efectivo para el electrón en la banda de conducción [24], μ_B es el magnetón de Bohr y S_z es la componente $\hat{z}$ del spin del electrón cuando el campo magnético se aplica en esta dirección. Realizando el procedimiento hecho anteriormente y aplicando cálculos sencillos, se encuentra una expresión adimensional para el nuevo hamiltoniano, con el término relacionado a el spin del electrón, de la siguiente forma:

$$H_{\rho\varphi} = -\left[\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\left(\rho\frac{\partial}{\partial\rho}\right) + \frac{1}{\rho^2}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right] - \gamma\left(\pm i\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) + \frac{1}{4}\gamma^2\rho^2 + \frac{2\tau}{\sqrt{\rho^2+d^2}} + \gamma g^* + V_\rho(\rho) \tag{3.15}$$

La anterior expresión es la forma final del hamiltoniano, el cual se ha reescrito con sus variables atildadas, ya que se conoce de antemano que sus unidades son adimensionales.

3.4 Ecuación de Schrödinger para el sistema

La ecuación de Schrödinger para el sistema formulado en este trabajo es la respectiva ecuación de valores propios:

$$H_{\rho\varphi}\Psi(\rho,\varphi) = \mathbf{E}\Psi(\rho,\varphi) \tag{3.16}$$

En donde $\mathbf{E}$ es la energía del sistema en unidades adimensionales y $\Psi(\rho,\varphi)$, es la función de onda sobre la cual actúa el hamiltoniano obtenido en la anterior sección, la respectiva ecuación de Schrödinger queda expresada como:

$$\left[-\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\left(\rho\frac{\partial}{\partial\rho}\right) - \frac{1}{\rho^2}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} - \gamma\left(\pm i\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) + \frac{1}{4}\gamma^2\rho^2 + \frac{2\tau}{\sqrt{\rho^2+d^2}} + \gamma g^* + V_\rho(\rho)\right]\Psi(\rho,\varphi)$$
$$= \mathbf{E}\Psi(\rho,\varphi) \tag{3.17}$$

Debido a que el sistema tiene simetría azimutal, la función de onda se puede expresar como el producto de dos funciones, una que representa esta parte azimutal y la otra que involucra la parte radial del sistema, realizando la separación de variables en ρ y en φ :

$$\Psi(\rho,\varphi) = \mathbf{\Phi}(\varphi)\mathbf{R}(\rho) = \mathbf{e}^{im\varphi}\mathbf{R}(\rho) \tag{3.18}$$

siendo m el número cuántico que describe esta parte azimutal, con la anterior separación de variables se obtiene:

$$\left[-\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\left(\rho\frac{\partial}{\partial\rho}\right)-\frac{1}{\rho^2}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}-\gamma\left(\pm i\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)+\frac{1}{4}\gamma^2\rho^2+\frac{2\tau}{\sqrt{\rho^2+d^2}}+\gamma g^*+V_\rho(\rho)\right]\mathbf{e}^{im\varphi}\mathbf{R}(\rho)$$

$$=\mathbf{E}\mathbf{e}^{im\varphi}\mathbf{R}(\rho) \tag{3.19}$$

Después de realizar las correspondientes derivadas la ecuación resultante se expresa:

$$-\frac{1}{\rho}\frac{d}{d\rho}\left(\rho\frac{d\mathbf{R}}{d\rho}\right)+\left[\frac{m^2}{\rho^2}+(\pm m)\gamma+\frac{\gamma^2}{4}\rho^2+g^*\gamma+\frac{2\tau}{\sqrt{\rho^2+d^2}}+V_\rho(\rho)\right]\mathbf{R}=\mathbf{E}\mathbf{R} \tag{3.20}$$

La anterior ecuación es la ecuación de Schrödinger radial para una impureza donadora, por lo que se aplica el método de barrido trigonométrico para calcular los valores propios de la energía del sistema. La ecuación de Schrödinger para el electrón libre en presencia de un campo magnético, tiene solución analítica. El procedimiento para calcular dicha solución se hace en el apéndice 8.

4

MÉTODO DE BARRIDO TRIGONOMÉTRICO PARA EL SISTEMA

La complejidad de la ecuación de Schrödinger 3.20 obtenida en el capitulo anterior para el problema de la impureza en sistemas de bicapas, bajo la acción de un campo magnético, exige la utilización de métodos numéricos para encontrar su solución, es decir para hallar la función de onda $\mathbf{R}(\rho)$ y los correspondientes niveles energéticos $\mathbf{E}$. El método que se utilizo para hallar tal solución, se denomina método de "*Barrido Trigonométrico*" *.

4.1 Planteamiento

Denotando $\mathbf{R}''$ y $\mathbf{R}'$ como la segunda y primera derivada de $\mathbf{R}$ respecto a ρ, respectivamente, la ecuación de Schrödinger 3.20 se reescribe,

$$\mathbf{R}'' + \frac{1}{\rho}\mathbf{R}' + \left[\mathbf{E} - \left(\frac{m^2}{\rho^2} + (\pm m)\gamma + \frac{\gamma^2}{4}\rho^2 + g^*\gamma + \frac{2\tau}{\sqrt{\rho^2 + d^2}} + V_\rho(\rho)\right)\right]\mathbf{R} = 0. \tag{4.1}$$

*Mayor información sobre este método en la referencia [19].

La anterior ecuación junto con las condiciones de contorno representa el problema de Sturm Liouville:

$$\begin{aligned}
&\mathbf{R}'' + \mathbf{h}(\rho)\mathbf{R}' + \mathbf{q}(\rho)\mathbf{R} = 0\,; \quad \mathbf{R}(0) < \infty\,; \quad \mathbf{R}(\infty) = 0 \\
&\mathbf{h}(\rho) = \frac{1}{\rho}\,; \\
&\mathbf{q}(\rho) = \mathbf{E} - \mathbf{V}_{efect}(\rho)
\end{aligned} \tag{4.2}$$

En donde se hizo:

$$\mathbf{V}_{efect}(\rho) = \left(\frac{m^2}{\rho^2} + (\pm\, m)\gamma + \frac{\gamma^2}{4}\rho^2 + g^*\gamma + \frac{2\tau}{\sqrt{\rho^2 + d^2}} + V_\rho(\rho) \right) \tag{4.3}$$

Las condiciones de contorno se buscan de forma que la función de onda sea finita en el origen y en el infinito se anule. Estas condiciones de contorno presentan problemas en los cálculos numéricos, para evitar estos inconvenientes, se realiza la sustitución:

$$\mathbf{R} = \rho^\alpha \chi(\rho) \tag{4.4}$$

mediante la cual, después de cálculos y simplificaciones, se obtiene el problema:

$$\begin{aligned}
&\chi'' + \mathbf{w}(\rho)\chi' + \mathbf{u}(\rho)\chi = 0\,; \quad \chi(0) < \infty\,; \quad \chi(\infty) = 0\,; \\
&\mathbf{w}(\rho) = \frac{2\alpha + 1}{\rho}\,; \\
&\mathbf{u}(\rho) = \mathbf{E} + \frac{\alpha^2}{\rho^2} - \mathbf{V}_{efect}(\rho)\,;
\end{aligned} \tag{4.5}$$

el valor de α se toma igual al número cuántico m con el fin de eliminar el término proporcional a ρ^{-2}, razón por la cual el problema 4.5 se reduce a:

$$\begin{aligned}
&\chi'' + \mathbf{w}(\rho)\chi' + \mathbf{u}(\rho)\chi = 0\,; \quad \chi(0) < \infty\,; \quad \chi(\infty) = 0\,; \\
&\mathbf{w}(\rho) = \frac{2m + 1}{\rho}\,; \\
&\mathbf{u}(\rho) = \mathbf{E} - \left(\pm\, m\gamma + \frac{\gamma^2}{4}\rho^2 + g^*\gamma + \frac{2\tau}{\sqrt{\rho^2 + d^2}} + V_\rho(\rho) \right).
\end{aligned} \tag{4.6}$$

4.2 Aplicación de Barrido trigonométrico

Para resolver el problema de contorno 4.6 se utiliza el método de barrido trigonométrico en el cual la ecuación diferencial de segundo orden se reduce a otra ecuación de primer orden a través de cambio de coordenadas a las coordenadas polares de Poincaré:

$$\left.\begin{array}{c} \chi(\rho) = A(\rho)\cos(\theta(\rho)) \\ \chi'(\rho) = A(\rho)\sin(\theta(\rho)) \\ \tan(\theta(\rho)) = \dfrac{\chi'(\rho)}{\chi(\rho)} \end{array}\right\} \tag{4.7}$$

A partir de las cuales se obtiene la ecuación diferencial para $\theta(\rho)$ y la expresión para $\mathbf{A}(\rho)$:

$$\theta'(\rho) = -\left[\sin^2(\theta(\rho)) + \mathbf{u}(\rho)\cos^2(\theta(\rho)) + \mathbf{w}(\rho)\sin(\theta(\rho))\cos(\theta(\rho))\right] \tag{4.8}$$

$$A(\rho) = A\exp\left[\int \left[(1-\mathbf{u}(\rho))\sin(\theta(\rho))\cos(\theta(\rho)) - \mathbf{w}(\rho)\sin^2(\theta(\rho))\right] d\rho\right];\ A(0) = 1. \tag{4.9}$$

Donde las funciones $\mathbf{u}(\rho)$ y $\mathbf{w}(\rho)$ vienen dadas por 4.6.
Del análisis de las condiciones de contorno para la función de onda, cuando ρ tiende a cero y cuando tiende a infinito, se pueden hallar las respectivas condiciones para la ecuación 4.8.
Cuando $\rho \to 0$ se encuentra una singularidad en 4.6, en el término que contiene la función $\mathbf{w}(\rho)$; esta singularidad exige que $\chi'(\rho)$ sea nula para $\rho = 0$, lo cual por medio de la relación 4.7 se encuentra que cuando $\rho = 0$, $\theta(0) = 0$.
La función $\chi(\rho)$ se anula en el infinito ($\rho \to \infty$) solo cuando $\theta(\infty) \to -\pi/2 - n_\rho\pi$ con $n_\rho = 0, 1, 2, 3, ...$ que es el número cuántico de radial [19].

La ecuación 4.8 junto con las condiciones de contorno enunciadas anteriormente, definen un problema de Cauchy para una ecuación diferencial de primer orden, el cual se puede resolver numéricamente para cada parámetro de energía **E**, bajo un soporte computacional. El programa para resolver este problema de Cauchy fue elaborado en lenguaje **Fortran**. Cabe resaltar que para cálculos numéricos no existe un punto en el infinito, entonces para efectos de programación, el límite para cuando $\rho \to \infty$, se reemplaza por un valor R_{max} lo suficientemente grande comparado con el radio de confinamiento.
Con este planteamiento, el problema de contorno queda expresado de la siguiente manera:

$$\theta'(\rho) = -\left[\sin^2(\theta(\rho)) + \mathbf{u}(\rho)\cos^2(\theta(\rho)) + \mathbf{w}(\rho)\sin(\theta(\rho))\cos(\theta(\rho))\right]$$

$$\theta(R_{max}) = -\pi/2 - n_\rho\pi\,; \quad n_\rho = 0, 1, 2, 3, ... \tag{4.10}$$

$$\theta(0) = 0\,;$$

el cual es el soporte matemático utilizado en los cálculos computacionales, realizados para hallar los niveles energéticos de la impureza en el sistema de bicapas, y para encontrar su energía de enlace en función de los parámetros considerados, tales como el radio de confinamiento, la distancia de separación entre las bicapas y el campo magnético aplicado.

5

ESPECTRO ENERGÉTICO

El aspecto más importante de la solución de la ecuación de Schrödinger en un sistema cuántico, es obtener el espectro energético del sistema.
En el presente trabajo se presentan algunos de los estados del espectro de energías para el sistema considerado, obtenidos numéricamente mediante el método de barrido trigonométrico, utilizando un soporte computacional elaborado en lenguaje FORTRAN.

5.1 NIVELES ENERGÉTICOS:

Los niveles energéticos se clasifican de acuerdo a los números cuánticos: radial y azimutal, n_ρ y m respectivamente. Esta clasificación viene dada de la forma que se muestra en la tabla 5.1

	$m=0$	$m=\pm1$	$m=\pm2$	$m=\pm3$
$n_\rho=0$	1s	1p	1d	1f
$n_\rho=1$	2s	2p	2d	2f
$n_\rho=2$	3s	3p	3d	3f
$n_\rho=3$	4s	4p	4d	4f

Tabla 5.1: *Nomenclatura para los niveles electrónicos*

Al solucionar la ecuación 3.20 mediante el método de barrido trigonométrico, tomando como radio de confinamiento $R_0 = 3{,}0\, a_0^*$ y con campo magnético $B = 0\, T$, los resultados obtenidos por el software elaborado para los primeros tres números cuánticos m con los tres primeros niveles n_ρ se muestran en la tabla 5.2

ESTADO	Energía($Ry*$)
1s	-0.7204
1p	0.41986
1d	1.70539
2s	1.86701
2p	3.80604
2d	6.04292
3s	6.32157
3p	9.20626
3d	10.3834

ESTADO	Energía($Ry*$)
1s	0.11044
1p	1.01889
1d	2.20201
2s	2.59964
2p	4.48158
2d	6.65053
3s	7.04778
3p	9.90417
3d	13.0431

Tabla 5.2: *Niveles energéticos. Izquierda*: ($d = 1a_0^*$); *Derecha* ($d = 4a_0^*$). *Con* $R_0 = 3\,a_0^*$.

Los resultados mostrados en la tabla 5.2, para los niveles energéticos, según la clasificación de la tabla 5.1, corresponden a dos distancias diferentes de separación entre las bicapas, con lo cual se observa que para cuando la distancia se hace mayor, la energía aumenta, esto es debido a que el electrón comienza a sentir en menor proporción la influencia de la donadora. La razón por la cual para una distancia $d = 1\,a_0^*$, la energía en el estado $1s$ es negativa, se debe a que el aporte de la interacción coulombiana sobre el electrón, es mayor con lo que se da una disminución considerable en la energía del sistema, ya que este potencial es negativo, el límite tomado para el valor mínimo de la energía potencial de la impureza donadora, corresponde a $U \to -2/d$ para cuando $\rho \to 0$.

5.2 Efecto de la distancia sobre la energía del sistema.

La distancia de separación entre las bicapas es uno de los parámetros tomados más significativos, ya que a medida que esta distancia disminuye se presenta una disminución de la energía de la donadora. Cuando la distancia entre las bicapas tiende a cero, la energía de la donadora tiende a la energía del átomo de hidrógeno bidimensional, siempre y cuando no haya confinamiento en las bicapas.
La energía de la donadora en función de la distancia entre bicapas se calculó para los estados *1s*, *1p* y *1d* de acuerdo a la nomenclatura para los estados energéticos dados en la tabla 5.1.

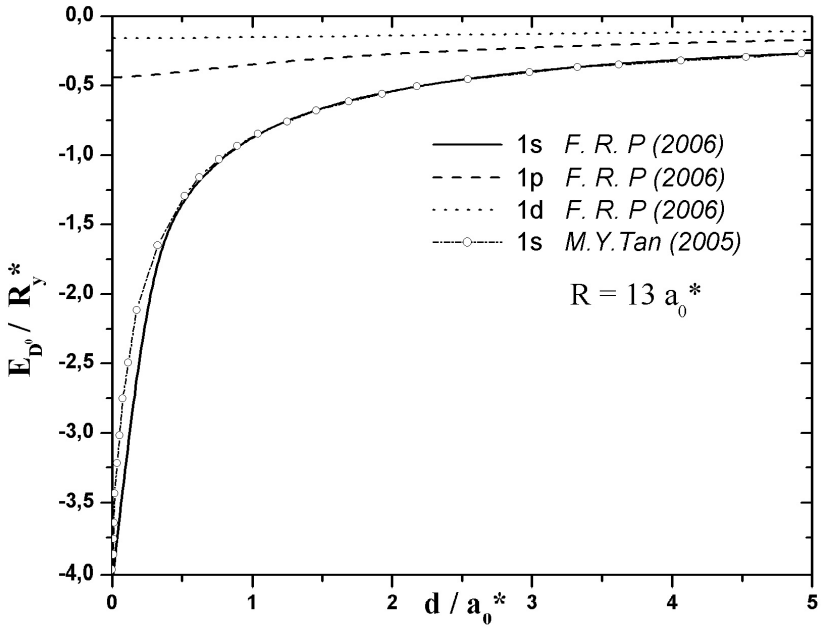

figura 5.1: *Energía de la D^0 en el estado $1s, 1p$ y $1d$ en función de la distancia enter bicapas.*

En la anterior figura se presenta una comparación para el estado *1s* con los resultados obtenidos por M. Y. J. Tan **et. al.** [22] en el cálculo de la energía de un excitón en un sistema de bicapas, con el electrón y el hueco separados espacialmente. En esta misma figura, la línea sólida representa los resultados obtenidos mediante el software elaborado en este trabajo, y la línea con puntos son los resultados de M. Y. J. Tan **et. al**. Los datos de comparación corresponden a sistemas diferentes, ya que en el citado trabajo se estudio un excitón, motivo por el cual esta comparación se presenta de forma cualitativa. El punto de partida para esta comparación consiste en que tanto para el excitón como para la donadora, se tiene un potencial de interacción Coulombiana atractivo, en donde la masa del hueco es mucho mayor que la masa del electrón, similitud que se da con

la impureza donadora, y debido a esto los dos sistemas corresponden análogamente al átomo de Hidrógeno bidimensional.

En la figura **??** se observa que para cuando la distancia disminuye hasta $d = 0$ la energía en el estado base tiende al valor mínimo $E_{D^0} = -4R_y^*$, para el estado $1p$, y el estado $1d$, la energía de la impureza donadora es $-0.\overline{44}\, R_y^*$ y $-016\, R_y^*$, respectivamente, datos que corresponden a los valores de la energía para el átomo de hidrógeno bidimensional. La ecuación 3.20 tiene solución analítica para cuando $d = 0$ y $B = 0$, este caso corresponde al problema del átomo de Hidrógeno bidimensional, ya que se tiene que las bicapas se encuentran unidas y el electrón es libre de moverse sólo en un plano por que no hay confinamiento en las bicapas. En la teoría de escalamiento dimensional [25] se demuestra que los niveles de energía para el átomo de hidrógeno en un espacio de D dimensiones obedecen la siguiente relación:

$$E_n = -\frac{Ry}{\left[n + \left(\frac{D-3}{2}\right)\right]^2}\,, \tag{5.1}$$

en donde $\boldsymbol{n} = 1, 2, 3...$ es el número cuántico principal dado por la relación ($n = n_\rho + m + 1 = 1$). Los valores para la energía en el estado base ($n = 1$), en los casos tridimensional, bidimensional y unidimensional ($D = 3\,, D = 2\, y\, D = 1$) respectivamente, son:

$$E_1 = \begin{cases} -1\, Ry\,; & D = 3 \\ -4\, Ry\,; & D = 2 \\ -\infty\,; & D = 1 \end{cases} \tag{5.2}$$

Para $n = 2$, la energía de el átomo de hidrógeno bidimensional ($D = 2$) es $-0{,}444\, Ry$ y para $n = 3$ esta energía tiene un valor de $-0{,}16\, Ry$, estos valores de la energía corresponden a los estados $1p \equiv (n_\rho = 0\,, , m = 1)$ y $1d \equiv (n_\rho = 0\,, , m = 2)$ respectivamente, mostrados en la figura 5.1, para cuando $d = 0$.
El anterior análisis se realizo como chequeo del método utilizado y de la programación realizada.

En la figura 5.2 se muestra la variación de la energía de la impureza respecto a la distancia de separación entre las bicapas, considerando un confinamiento radial dado por el potencial de confinamiento $V_\rho(\rho)$. Se observa que los valores de d para los cuales la energía de la donadora es negativa corresponden a aquellas distancias para las cuales los estados se encuentran ligados, es decir en los que predomina el término de la interacción Coulombiana. En esta figura también se observa que para ciertas distancias d, la energía toma valores positivos, esto se debe a que para estas distancias, el electrón comienza a sentir con poca intensidad la influencia de la impureza, es decir, para estas distancias

el término predominante es el correspondiente a la energía cinética del electrón. En general se obtuvo que estas distancias son algo mayores que el radio de confinamiento en las bicapas.
En esta misma figura se ilustra la variación de la energía para los estados $1p$ y $1d$, estos estados presentan una energía mayor que la del estado base; pero a su vez dichos estados no presentan una variación considerable de la energía conforme la distancia d aumenta, hecho que también ocurre para los demás estados excitados y cuyos resultados no son objeto de estudio en este trabajo.

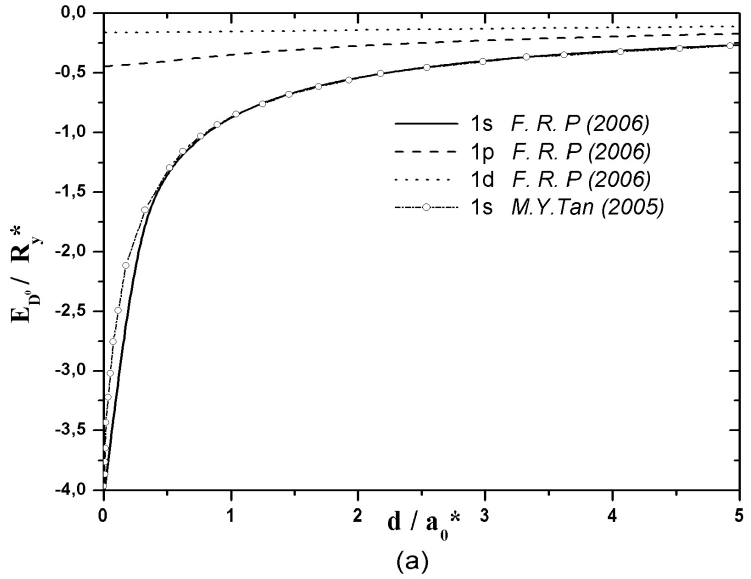

figura 5.2: *Energía de la D^0 en los estados $1s$, $1p$, $1d$ en función de la distancia.*

5.3 Energía de la D^0 en función del radio de confinamiento.

Otro aspecto de gran importancia cuyo análisis se reporta con frecuencia en los trabajos hechos en el área de las heteroestructuras semiconductoras, es el comportamiento de la energía de excitones e impurezas confinados en QD´s.
En este trabajo se obtuvieron las gráficas mostradas en la figura 5.3, en las que se observa la dependencia de la energía con el radio de confinamiento en las bicapas. En esta figura se puede observar el mismo comportamiento que se presento en la figura 5.2. Para cuando la distancia de separación entre las bicapas aumenta, la energía se hace mayor, es decir, el término coulombiano que es el encargado de dar el aporte de

energías negativas, comienza a hacerse más pequeño, dando lugar a que el rango de energías negativas disminuya.
Por otro lado se observa que la energía de la impureza aumenta, conforme el radio de confinamiento disminuye, esto se debe a que la zona de confinamiento en las bicapas se va haciendo más reducida, lo que conlleva a que los niveles energéticos de el electrón suban, es decir, su energía aumente. En los extremos de estas distancias, se observo

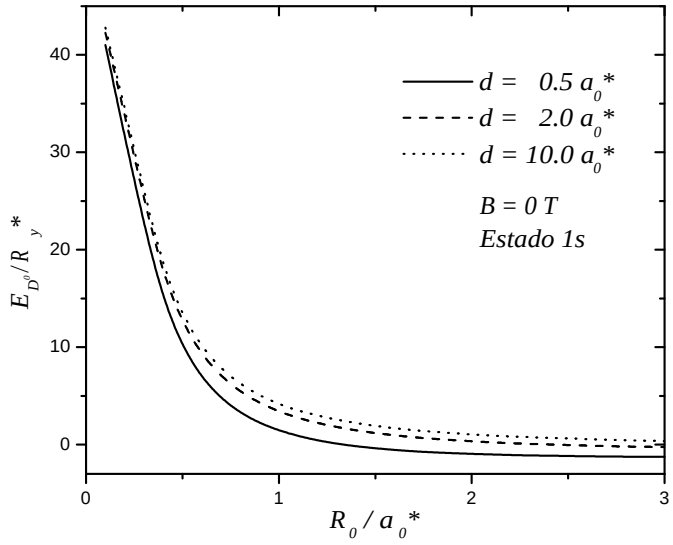

figura 5.3: *Energía de la donadora en función del radio de confinamiento, para distancias entre bicapas de*: $d = 0{,}5\,a_0^*$, $d = 2\,a_0^*$ y $d = 10\,a_0^*$.

tal efecto para los estados $1s$, $2s$ y $3s$, como se ilustra en la figura 5.4 en la que se ve claramente el aumento de la energía de la donadora conforme la distancia entre bicapas se hace mayor. Para una distancia entre bicapas de $0{,}5\,a_0^*$ el estado *1s* presenta estados ligados para radios de confinamiento aproximadamente mayores a $1{,}3\,a_0^*$, mientras que para $d = 10\,a_0^*$, este estado no presenta estados ligados en el rango de radios tomados. Para el estado $2s$ se observa que la energía de la impureza tiende a ser negativa para radios mayores de $4\,a_0^*$ con una distancia $d = 0{,}5\,a_0^*$ entre bicapas, en tanto que para el estado $3s$ la energía de la donadora es positiva cuando el radio es $4\,a_0^*$.

En la presente sección se mostraron los resultados obtenidos para la energía de la donadora en función del radio de confinamiento en las bicapas, sin la presencia de campo magnético. Otros resultados obtenidos, en los que se observa la variación de esta energía para el electrón libre con una distancia constante entre las bicapas, muestran que esta

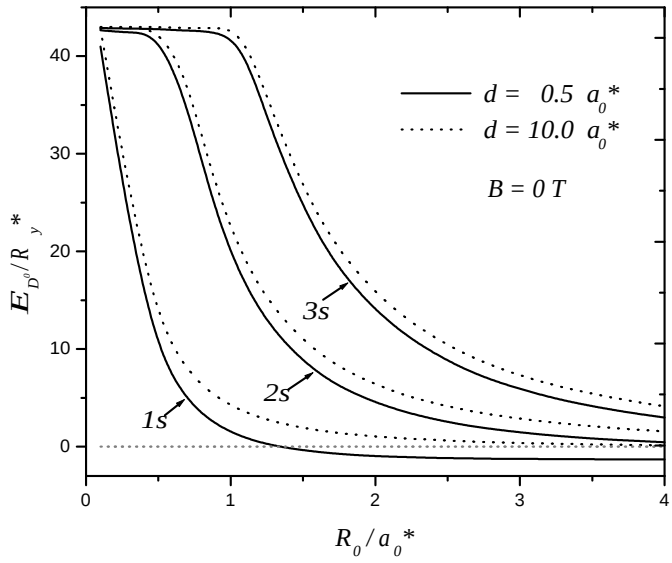

figura 5.4: *Energía de la donadora para los estados* 1**s**, 2**s** y 3**s**, *en función del radio de confinamiento, para distancias entre bicapas* $d = 0{,}5\, a_0^*$ *y* $d = 10\, a_0^*$.

dependencia de la energía del electrón, no difiere en gran medida, de la energía de la donadora, para valores pequeños de los radios; este caso se ilustra en las gráficas 5.5 y 5.6, en las cuales se considera una distancia igual al radio de confinamiento, y una distancia menor a tal radio, respectivamente.

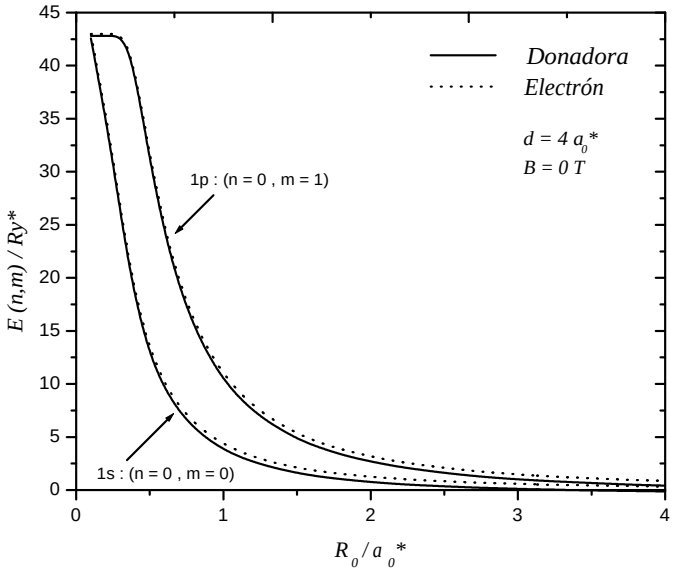

figura 5.5: *Energía de la donadora y el electrón libre, para los estados* $1s$ y $1p$ *en función del radio de confinamiento, para una distancia entre bicapas* $d = 4{,}0\, a_0^*$.

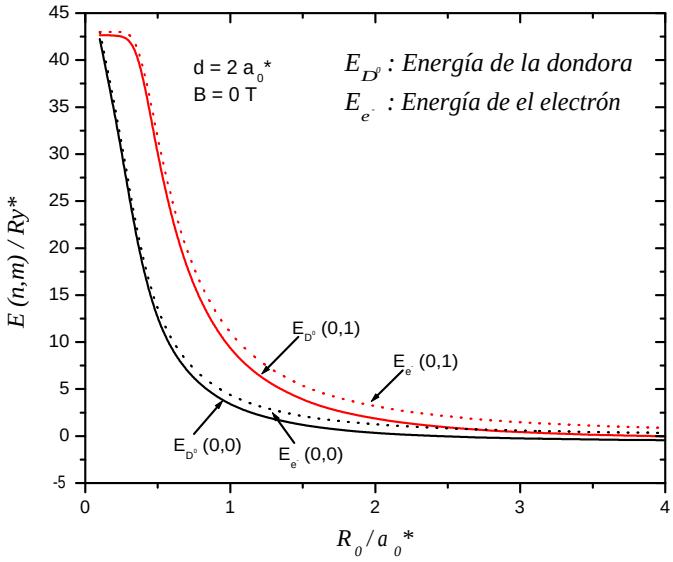

figura 5.6: *Energía de la donadora y el electrón libre para los estados* $1s$ y $1p$ *como función del radio de confinamiento para una distancia entre las bicapas,* $d = 2{,}0\, a_0^*$.

6

ENERGÍA DE ENLACE: E_b

En este trabajo se reportan resultados sobre la energía de enlace de la impureza D^0 y su dependencia con la distancia de separación de las bicapas y el radio de confinamiento. La forma que se utilizo en este trabajo, para el cálculo de la energía de enlace corresponde a la ecuación 6.1, esta expresión para la energía no tiene como nivel de referencia el estado base del electrón, es decir, cuando $\tau = 0$, $n_\rho = 0$ y $m = 0$. La energía de enlace corresponde a los estados dados por los números cuánticos $\mathbf{n}_\rho$ y m, de acuerdo a:

$$E_b(n_\rho, m, R, d) = E(n_\rho, m, R, d, \tau = 0) - E(n_\rho, m, R, d, \tau = -1) \tag{6.1}$$

Siendo E_b la energía de enlace, $E(n_\rho, m, R, d, \tau = 0)$ es la energía del electrón sin la impureza presente y $E(n_\rho, m, R, d, \tau = -1)$ es la energía del electrón con la impureza presente en el estado (n_ρ, m). Donde R es el radio de confinamiento y d es la distancia de separación entre las bicapas.

6.1 Energía de enlace de la D^0 en función de d

Los resultados obtenidos para la energía de enlace en los estados $1s$, $1p$ y $1d$ se visualizan en la figura 6.1, en esta figura se observa que la energía de enlace para cada estado aumenta conforme la distancia de separación entre las bicapas disminuye, hecho que se analizó con los resultados anteriores para la energía de la donadora. Otro aspecto que se nota en esta misma figura es que la energía de enlace para los estados $1p$ y $1d$

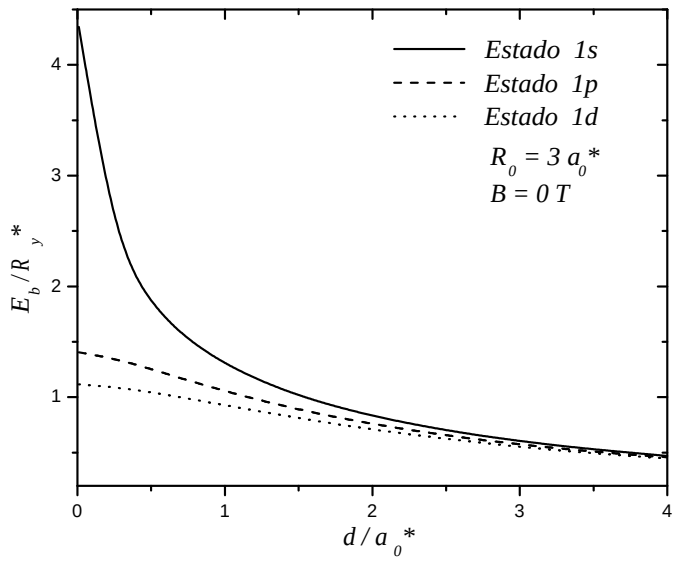

figura 6.1: *Energía de enlace de la D^0 en el estado $1s$, $1p$ y $1d$ en función de la distancia.*

es menor que la energía de enlace en el estado base; pero estos estados presentan a su vez una variación menos notoria respecto a la distancia, en comparación al estado $1s$. La energía de enlace es la diferencia entre la energía del electrón ($\tau = 0$) y la energía de la donadora ($\tau = -1$) en la ecuación 3.20, de acuerdo a esto se obtienen resultados positivos, ya que la energía del electrón libre es mayor que la energía de la donadora. Los respectivos valores obtenidos para los niveles energéticos del electrón se expresan en la tabla 6.1

Estado	Energía ($Ry*$)
$1s$	0,82112
$1p$	2,08353
$1d$	3,74067
$2s$	4,31929
$2p$	6,9679
$2d$	10,0161

Tabla 6.1: *Energía para el electrón libre, con $R_0 = 2{,}5a_0*$*

Al considerarse el caso $\tau = 0$ (sin interacción coulombiana) la energía del electrón es constante, los valores de estas energías se muestran en la tabla . El valor de esta

energía aumenta a medida que se aumenta el número cuántico radial n_ρ y el azimutal m. La energía de enlace disminuye a medida que la distancia de separación aumenta, como se menciono anteriormente, a distancias grandes (mayores que el el radio R_0) la interacción del electrón con la impureza se reduce considerablemente, y la energía de enlace disminuye en forma notable.

6.2 Energía de enlace de la D^0 en función de R_0

La energía del electrón y de la donadora varían con el radio R_0 como se observa en las figuras 5.5 y 5.6, debido a esto la energía de enlace también presenta cierta dependencia respecto a este parámetro, esta dependencia de la energía de enlace con el radio de confinamiento se muestra en la figura 6.2

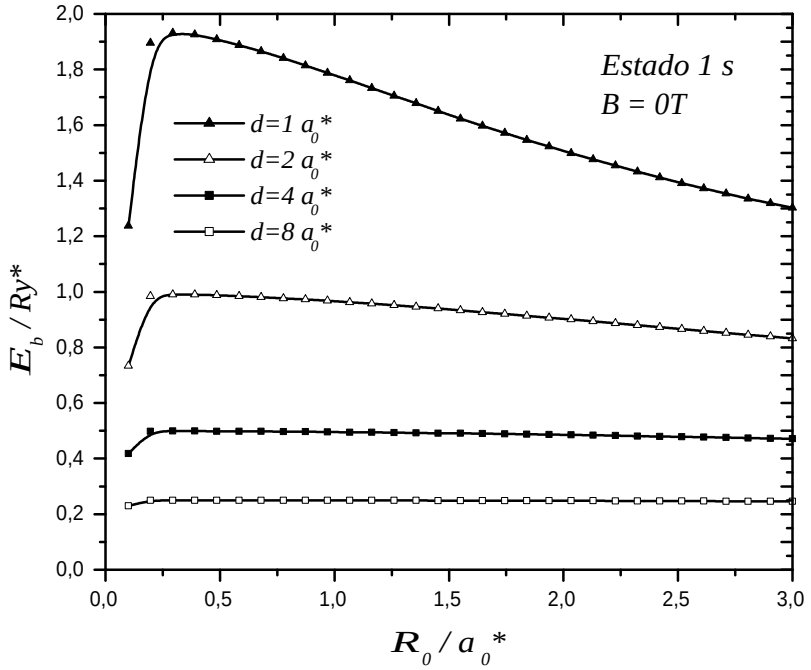

figura 6.2: *Energía de enlace de la D^0 en el estado $1s$ en función del radio R_0, para diferentes distancias d.*

En la figura anterior se ve que la energía de enlace, tiene un cambio significativo para aquellas distancias pequeñas como $d = 1\,a_0*$ y $d = 2\,a_0^*$ las cuales son menores al radio

de confinamiento, y para aquellas distancias como $d = 4\,a_0^*$ y $d = 8\,a_0^*$, las cuales son mayores que tal radio , la energía de enlace presenta una mínima variación, es decir, tiende a mantenerse constante; esto se debe esencialmente al efecto de la distancia de separación entre las bicapas en el término de la interacción Coulombiana. Esto se puede ver de la siguiente forma, el electrón a una distancia alejada de la donadora va a sentir con menor intensidad la interacción atractiva producida por la misma, y por lo tanto se requerirá de menos energía para liberarlo de esta influencia. Esta energía requerida es la energía de enlace.
Respecto a la dependencia de la energía de enlace con el radio R_0, para distancias pequeñas (menores que R_0), se observa que, cuando $d = 1\,a_0^*$ y $d = 2\,a_0^*$, se presenta un aumento significativo de la energía de enlace a medida que se reduce el radio confinamiento, esto sucede porque al reducir la zona en la cual el electrón esta confinado, los niveles energéticos suben dentro del pozo de potencial. Este aumento de la energía de enlace se produce hasta un punto en el cual el nivel de energía correspondiente al electrón llega al borde de el pozo de potencial finito (V_0), permaneciendo en ese valor de energía debido a que se desborda la función de onda, por otro lado la energía de la impureza donadora sigue aumentando siendo siempre menor que la energía constante a la que ha llegado el electrón, y esto conlleva a que la diferencia entre la energía del electrón y la donadora, comience a disminuir, es decir, la energía de enlace disminuye en cercanías al origen. Es este el comportamiento que se observa para la energía de enlace en los resultados mostrados en la figura 6.2.
Este comportamiento no es muy notorio para distancias tales como $d = 4\,a_0^*$ y $d = 8\,a_0^*$, cuyo efecto sobre el electrón no aporta significativamente en su energía, tal como se explico en la sección 5.2, por lo tanto, como la diferencia entre la energía del electrón y la impureza es muy pequeña, la energía de enlace permanece casi invariante.
En la figura 6.3 se muestran las gráficas para la energía de enlace de la impureza para el estado $1s$ y $1p$ en donde se observa la diferencia entre la energía para estos estados.

Como se vio en la sección 5.3 para otros estados diferentes al estado base, la energía tanto del electrón como de la donadora aumentaba, este aumento en la energía de la donadora, conlleva a que la energía de enlace de la misma, se reduzca respecto a estados mas bajos, tal como se esperaría que sucediera. La razón se debe a que el potencial de confinamiento es finito, y es el borde al cual puede llegar la energía del electrón a medida que se reduce el radio de confinamiento, cuando la energía del electrón llega a este borde, la energía de la impureza sigue aumentando, con lo cual la diferencia respecto a la energía del electrón, se reduce; pero en forma más notable que para el estado ***1s*** ya que la donadora tiene mayor energía en los siguiente estados a éste, en los cuales ocurre el mismo comportamiento.

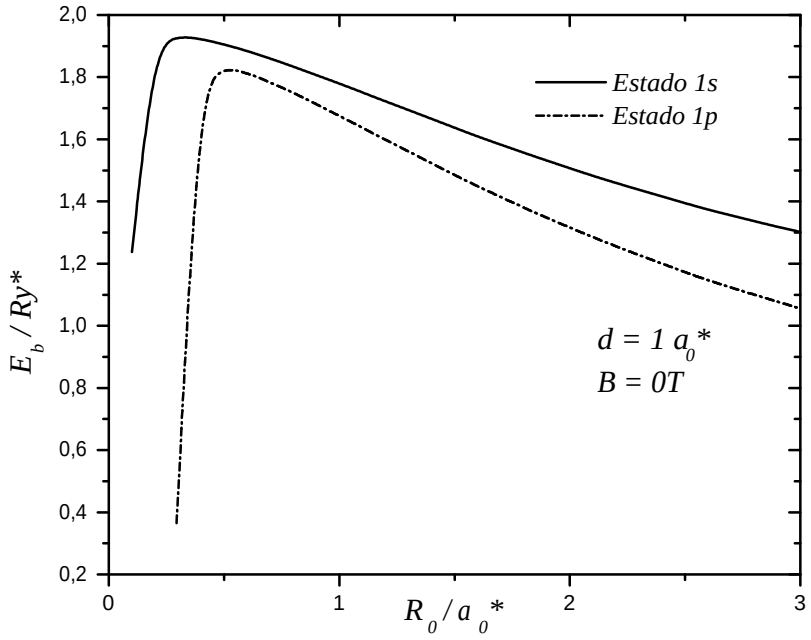

figura 6.3: *Energía de enlace de la* D^0 *en el estado* $1s$ y $1p$ *en función del radio* R_0, *para* $d = 2a_0^*$.

7

EFECTO DEL CAMPO MAGNÉTICO

En este capitulo se reportan los resultados obtenidos, cuando se aplica un campo magnético uniforme y perpendicular a las bicapas, es decir, en la dirección z. También se hace una descripción del efecto de este campo magnético, sobre la energía del sistema, para algunos estados energéticos tomados de acuerdo a la nomenclatura dada en la tabla 5.1. En las tablas 7.1 y 7.2 se dan los valores de la energía de la impureza, correspondientes a campos aplicados de 0, 10 y 20 *Teslas*, manteniendo un radio fijo $R_0 = 3\,a_0^*$ y tomando dos distancias de separación entre las bicapas de $1\,a_0^*$ y $4\,a_0^*$.

Se observa en estos resultados que la energía aumenta para cada estado energético

ENERGÍA (Ry^*)			
$ESTADO$	$B = 0\,T$	$B = 10\,T$	$B = 20\,T$
1s	-0.7204	-0,07732	1,09646
1p	0.41986	0,28982	1,34744
1d	1.70539	0,64836	1,52231
2s	1.86701	3,33761	6,85421
2p	3.80604	4,02841	7,00164
2d	6.04292	5,01763	7,2159
3s	6.32157	7,88171	12,61535
3p	9.20626	9,43921	13,04117
3d	10.3834	11,3265	13,73839

Tabla 7.1: *Estados energéticos para diferentes valores del campo magnético* B, *con* $R_0 = 3\,a_0^*$ *y* $d = 1\,a_0^*$.

consecutivo conforme el campo magnético se hace más intenso.

El aumento dado en la energía cuando se aplica un campo magnético, se debe a que

ENERGÍA (Ry^*)			
$ESTADO$	$B = 0\,T$	$B = 10\,T$	$B = 20\,T$
1s	0,11044	0,88907	2,21362
1p	1.01889	0,98959	2,2249
1d	2.20201	1,20909	2,24051
2s	2.59964	4,04276	7,65021
2p	4.48158	4,68639	7,70591
2d	6.65053	5,62191	7,84528
3s	7.04778	8,57889	13,29551
3p	9.90417	10,1198	13,69329
3d	13,0431	11,9715	14,36234

Tabla 7.2: *Estados energéticos para diferentes valores del campo magnético B, con $R_0 = 3\,a_0^*$ y $d = 4\,a_0^*$.*

este campo magnético produce un efecto de confinamiento adicional sobre el electrón, aumentando la energía del mismo y por consiguiente la energía del sistema. El aumento sobre la energía del electrón viene dado por aquellos términos que contienen el factor de Landau γ en la expresión para la energía 19 obtenida en el apéndice.

7.1 Energía de la donadora en función del campo magnético

Ya se mostró en las tablas 7.1 y 7.2 que la energía para la impureza donadora en el sistema de bicapas aumenta cuando se aplica un campo magnético sobre el sistema.
En las figuras 7.1 y 7.2 se representa una mejor visualización de la variación de la energía de la donadora para los tres primeros estados de n_ρ, tomando distancias de separación entre las bicapas de $d = 1\,a_0^*$ y $d = 4\,a_0^*$ respectivamente.

En la figura 7.2 se observa que los estados $1s$, $1p$ y $1d$ convergen, para cuando $B < 20\,T$, en tanto que los estados $2s$, $2p$ y $2d$ convergen para un valor del campo magnético mayor a $\approx 25\,T$. En la figura 7.1 se ve que los estados energéticos presentan el mismo comportamiento; pero en este caso la convergencia de los estados se manifiesta para cuando el campo magnético es mayor a $30\,T$.
El comportamiento que presenta la energía en las figuras 7.1 y 7.2 se debe al aporte conjunto de los términos paramagnético, diamagnético y el término relacionado con el factor de Lande, $\pm\, m\gamma$, $\frac{\gamma^2}{4}\rho^2$ y $g^*\gamma$, respectivamente en la ecuación 3.20.
Los anteriores términos magnéticos son de naturaleza lineal ($\pm\, m\gamma$ y $g^*\gamma$), y cuadrática ($\frac{\gamma^2}{4}\rho^2$) respecto al campo, por lo que la energía también varia de esta forma respecto a

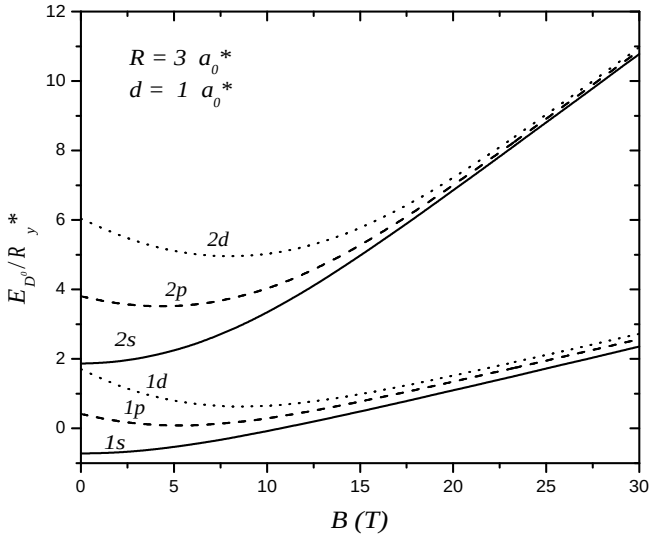

figura 7.1: *Energía de la D^0 en función del campo magnético B, para los estados 1s, 1p, 1d, 2s, 2p, 2d para $R_0 = 3\,a_0^*$ y $d = 1\,a_0^*$.*

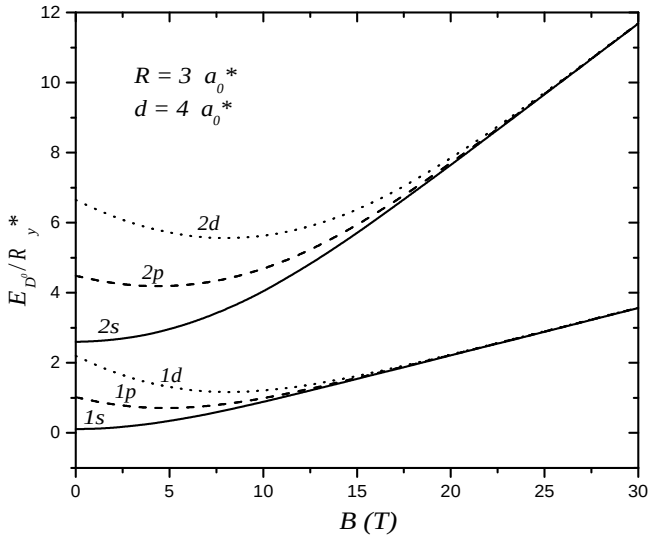

figura 7.2: *Energía de la D^0 en función del campo magnético B, para los estados 1s, 1p, 1d, 2s, 2p, 2d para $R_0 = 3\,a_0^*$ y $d = 4\,a_0^*$.*

éste. El término diamagnético es el responsable del incremento de los niveles energéticos y el término paramagnético, produce una disminución de todos los estados electrónicos diferentes al '$\boldsymbol{s}$', esto se debe a que para estos estados se tiene $m = 0$ por lo que el término paramagnético no interviene; el anterior efecto se hace más notorio para los niveles de mayor valor absoluto del número cuántico $\boldsymbol{m}$.
En la figura 7.3 se muestran curvas de la dependencia de la energía de la impureza donadora con la distancia de separación d, variando parámetros tales como el campo magnético y el radio de confinamiento, con el fin de observar el tipo de confinamiento que predomina en estas condiciones.

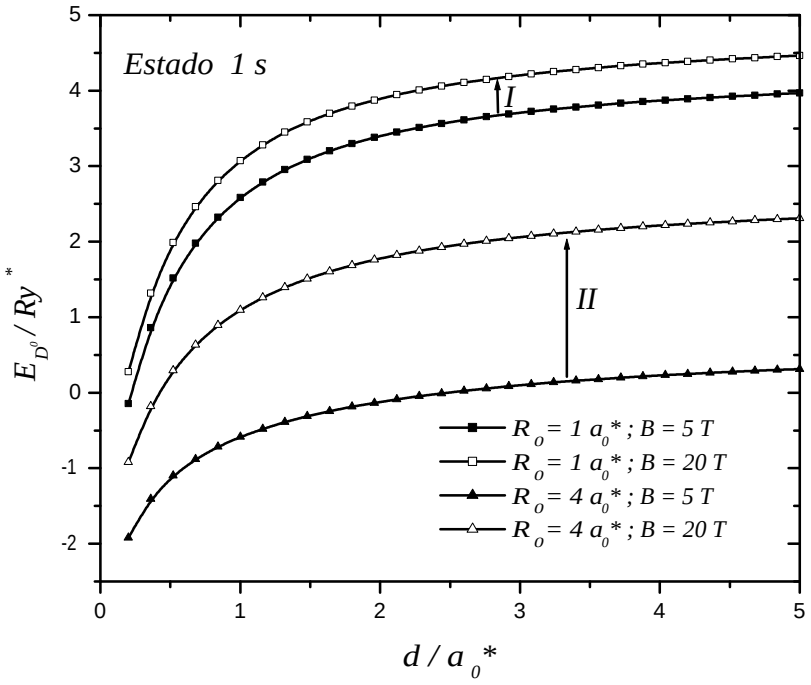

figura 7.3: *Energía de la D^0 en el estado $1s$ en función de d, para diferentes valores del campo magnético y el radio R_0.*

Para describir esta dependencia de la energía para la impureza donadora, con parámetros tales como B y R_0, se han considerado casos para los cuales el campo es $B = 5\,T$ y $B = 20\,T$, y radios de $R_0 = 1\,a_0^*$ y $R_0 = 4\,a_0^*$.
En la misma figura se observa que para el primer caso cuando $R_0 = 1\,a_0^*$, la separación I entre las curvas correspondientes a campos de $B = 5\,T$ y $B = 20\,T$, es pequeña comparada con la separación II para cuando el radio corresponde a $R_0 = 4\,a_0^*$ con los mismos

campos aplicados. Este hecho indica que para radios grandes el efecto que predomina, es el confinamiento magnético, es éste el de mayor aporte en el aumento de los niveles energéticos dentro del pozo de potencial, caso contrario se da para radios pequeños, en los cuales el confinamiento predominante, es el confinamiento geométrico, para estos radios el campo magnético no tiene un aporte significativo en la energía del sistema.

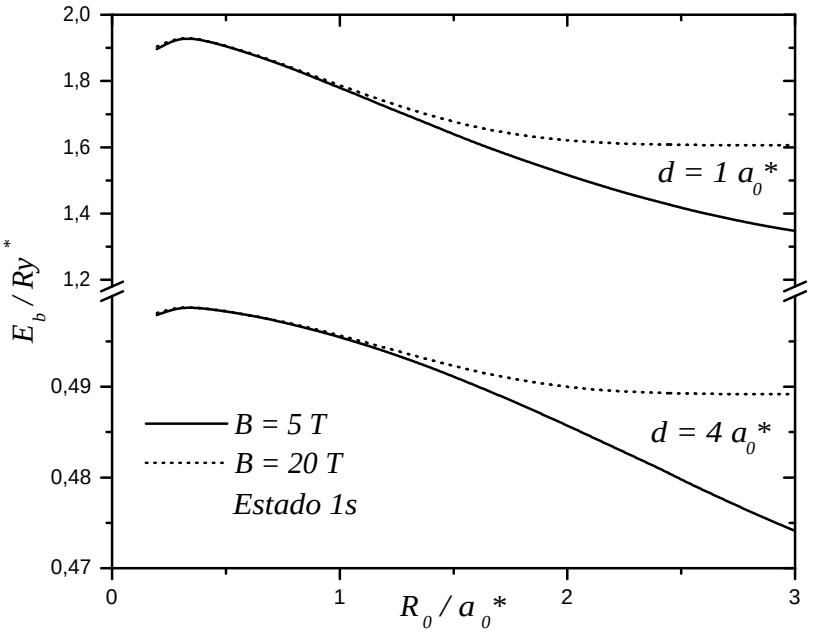

figura 7.4: *Energía de enlace de la D^0 en el estado $1s$ en función de R_0, para $B = 5\,T$ y $B = 20\,T$ a distancias $d = 1\,a_0^*$ y $d = 4\,a_0^*$.*

En la figura 7.4, se aprecia mejor el comportamiento para la energía de enlace de la donadora respecto al confinamiento radial y el confinamiento magnético, para distancias de separación entre las bicapas $d = 1\,a_0^*$ y $d = 4\,a_0^*$. Se ve que para radios grandes la separación entre curvas de energía se hace más pronunciada, en comparación a la separación de las curvas de energías correspondientes a radios pequeños.
En la misma figura también se aprecia el aumento sobre la energía de enlace a medida que se aumenta la intensidad del campo aplicado, este hecho se da como consecuencia del aumento de la energía del electrón, ya que éste se acelera en un movimiento circular,

cuando se aplica un campo magnético sobre el mismo, con lo cual el efecto de la donadora sobre la energía del electrón no es tan significativo, teniendo como consecuencia un aumento sobre la energía de enlace.
Se puede decir que para radios grandes el confinamiento se ve compensado por la influencia del campo magnético, mientras que para radios pequeños, los portadores de carga se han confinado tanto, como para que el confinamiento adicional producido por el campo magnético, no sea tan significativo.

8

ENERGÍA DE ENLACE: REPRESENTACIÓN 3-D

Por último se muestra en la figura 8.1 la dependencia de la energía de enlace, en función de la distancia de separación entre las bicapas y el radio de confinamiento en las mismas. Esta representación se hace en una superficie tridimensional con el fin de mostrar una concepción más completa de la dependencia de la energía de enlace con estos parámetros, ya que se obtiene mayor información en solo una gráfica, información estudiada en los capítulos capítulos anteriores.

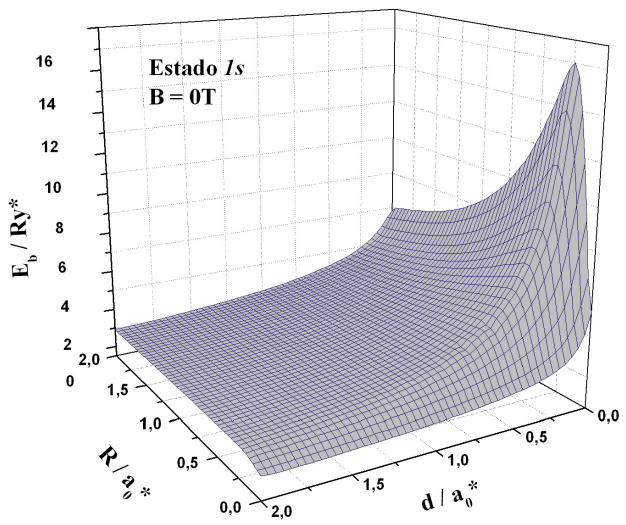

figura 8.1: *Energía de enlace de la* D^0 *en el estado* $1s$ *en función de* R_0 y d, *para* $B = 0T$

CONCLUSIONES

- Se presentó un método simple para calcular el espectro energético de una impureza donadora neutra localizada en un sistema de bicapas separadas espacialmente, en presencia de un campo magnético.
  Se presentaron algunos de los estados electrónicos correspondientes a este espectro y se estudio el efecto del campo magnético sobre estos estados, considerando el término asociado al factor de Lande en la heteroestructura.

- Se reportó la dependencia de la energía de la donadora y de la energía de enlace de la misma, con el radio de los discos en las bicapas y la distancia de separación entre estas.

- Se estudió el caso límite para cuando las bicapas no presentan confinamiento en las mismas y están separadas una distancia cercana a cero, analizando su respectiva relación con el átomo de Hidrógeno bidimensional.

- El aspecto más notorio del efecto que produce un campo magnético uniforme, sobre una impureza donadora neutra localizada en un sistema de bicapas, esta en el aumento de su energía debido al confinamiento adicional producido por este campo. Además se analizó el confinamiento adicional que produce el campo magnético sobre los portadores de carga, en comparación con el confinamiento geométrico existente en el sistema, hallándose que para radios lo suficientemente grandes, el confinamiento que predomina es el asociado al campo magnético; en tanto que para radios pequeños, el confinamiento de mayor aporte es el confinamiento geométrico.

- El método utilizado en este trabajo se adapta para el estudio de estos sistemas con excitones, pares de electrones e impurezas donadoras cargadas negativamente. En estos sistemas es de gran importancia el estudio del espectro energético, permitiendo analizar las transiciones entre bicapas.

APÉNDICE

ECUACIÓN DE SCHRÖDINGER PARA EL ELECTRÓN

Como información adicional, en este apéndice se plantea la solución de la ecuación de Schrödinger para el electrón en el sistema de bicapas .
Se parte del Hamiltoniano para un electrón en un disco bidimensional, bajo un campo magnético aplicado en dirección paralela al eje del disco:

$$H = \frac{1}{2m^*}\left[\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}\right]^2 + g^*\mu_B B S_z, \tag{1}$$

donde el potencial vector $\vec{A}$ se asume de la forma $\vec{A} = \frac{1}{2}(\vec{B} \times \vec{r})$, con el campo magnético orientado en la dirección $\boldsymbol{z}$, en coordenadas cilíndricas $A_\rho = A_z = 0$; $A_\varphi = \frac{1}{2}\rho B$ y $\vec{B} = B\hat{z}$.

En coordenadas cilíndricas el hamiltoniano 1, puede reescribirse en forma adimensional, mediante la utilización de los parámetros efectivos 3.1-3.2, con lo cual se obtiene:

$$H_{\rho\varphi} = -\left[\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\left(\rho\frac{\partial}{\partial\rho}\right) + \frac{1}{\rho^2}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right] - \gamma\left(\pm i\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) + \frac{1}{4}\gamma^2\rho^2 + \gamma g^* \tag{2}$$

Debido a que le sistema presenta simetría azimutal, se escoge una función de onda para el electrón, de la forma

$$\Psi(\rho,\varphi) = \mathbf{e}^{im\varphi}\Phi(\rho)\,, \tag{3}$$

donde m es un número entero. Ahora se plantea la ecuación de Schrödinger

$$H_{\rho\varphi}\Psi(\rho,\varphi) = \varepsilon_\rho\Psi(\rho,\varphi)\,, \tag{4}$$

siendo ε_ρ la energía para el electrón. Reemplazando el hamiltoniano 2 y la función de onda 3, se resuelve la ecuación 4, obteniéndose la expresión

$$\left[-\frac{1}{\rho}\frac{d}{d\rho}\left(\rho\frac{d}{d\rho}\right)+\frac{m^2}{\rho^2}+(\pm m)\gamma+\frac{\gamma^2}{4}\rho^2+g^*\gamma-\varepsilon_\rho\right]\Phi=0 \tag{5}$$

Haciendo el cambio de variable $x=\rho^2$ la ecuación 5 se transforma mediante un manejo algebraico adecuado, en

$$4x\frac{d^2\Phi}{dx^2}+4\frac{d\Phi}{dx}-\left[\frac{\gamma^2}{4}x+\frac{m^2}{x}+(\pm m)\gamma+g^*\gamma-\varepsilon_\rho\right]\Phi \tag{6}$$

Para resolver la ecuación 6, se estudia los casos limites: $x\to 0$ y $x\to\infty$, con el fin de encontrar las funciones solución en estos límites, y calcular una función en el caso intermedio a estos límites.

Límite para $x\to 0$

para este caso, la función $\Phi(x)$ se transforma en una función $U(x)$, y la ecuación 6 se transforma en

$$4x^2\frac{d^2U(x)}{dx^2}+4x\frac{dU(x)}{dx}-m^2U(x)=0 \tag{7}$$

La solución que satisface la ecuación 7 es

$$\mathbf{U}(x)=x^{|m|/2}\,, \tag{8}$$

la cual converge en el límite $x\to 0$

Límite para $x\to\infty$

En este límite la función $\Phi(x)$ tiende a una función $W(x)$ la cual se escoge de forma que sea convergente cuando $x\to\infty$. En este caso la ecuación 6 se transforma en

$$\frac{d^2W(x)}{dx^2} - \left(\frac{\gamma}{4}\right)^2 W(x) = 0 \tag{9}$$

y la solución que satisface a la ecuación 9 es

$$\mathbf{W}(x) = e^{-\frac{\gamma}{4}x}. \tag{10}$$

De la soluciones anteriores 8 y 10 para los casos límites de la ecuación 6, se encuentra que la solución a tal ecuación se puede escribir de la forma

$$\phi(x) = U(x)M(x)W(x)\ ; \tag{11}$$

donde $M(x)$ es una función solución para el caso intermedio de los límites analizados anteriormente. Reemplazando 11 en la ecuación general 6, y realizando las correspondiente derivación se encuentra que

$$4x\frac{d^2M}{dx^2} + 4\left(|m| + 1 - \frac{\gamma}{2}x\right)\frac{dM}{dx} + \left[\varepsilon_\rho - \left(g^* + (\pm m) + |m| + 1\right)\gamma\right]M = 0. \tag{12}$$

Haciendo un cambio de variable $y = \frac{\gamma}{2}x$ se llega a la ecuación

$$y\frac{d^2M}{dy^2} + (|m| + 1 - y)\frac{dM}{dy} + \left[\frac{\varepsilon_\rho - \left(g^* + (\pm m) + |m| + 1\right)\gamma}{2\gamma}\right]M = 0. \tag{13}$$

La solución general para la ecuación 13 es la función hipergeométrica confluente

$$M(y) = (a, b; y)\ ; \tag{14}$$

donde

$$\begin{aligned} y &= \frac{\gamma}{2}x = \frac{\gamma}{2}\rho^2\,, \\ a &= \frac{\varepsilon_\rho - \left(g^* + (\pm m) + |m| + 1\right)\gamma}{2\gamma}\,, \\ b &= |m| + 1 \end{aligned} \tag{15}$$

y sus valores propios son

$$\varepsilon_\rho = 2a\gamma + \left(g^* + (\pm m) + |m| + 1\right)\gamma \tag{16}$$

La solución más general a la ecuación 6 es por lo tanto

$$\Phi(\rho) = \rho^{|m|} e^{-(\gamma/4)\rho^2} e^{im\varphi} M\left(a, b; \frac{\gamma}{2}\rho^2\right) \tag{17}$$

Cuando a toma valores enteros positivos, n en la función $M(a, b; y)$, esta se transforma en la función $L(y)$ y la ecuación 13 se reduce a

$$y\frac{d^2L(y)}{dy^2} + (|m| + 1 - y)\frac{dL(y)}{dy} + nL(y) = 0. \tag{18}$$

Con las soluciones $L_m^n(x)$, denominados polinomios asociados de Laguerre, y valores para la energía:

$$\varepsilon_\rho = [2n + (g^* + (\pm m) + |m| + 1)]\,\gamma \tag{19}$$

REFERENCIAS

[1] J. Cibert, P. M. Petroff, G. J. Dolan, S. J. Pearton, A. C. Gossard, and J. H. English, Appl. Phys. Lett. **49**, 1275 (1986).

[2] John H. Davis, (*The physics of low-dimensional semiconductors-an introducction*), Cambridge University Press. (1998), p. 80.

[3] W. Hornischer, P. Grambow, T. Demel, E. Bauser, D. Heitmann, K. von Klitzing, and K. Ploog, Appl. Phys. Lett. **60**, 2998 (1998).

[4] G. Timp, Nanotechnology (Springer-Verlag, New York, 1999).
S. Foford, Appl. Phys. Lett. **76**, 2707 (2000).

[5] N. N. Lendentsov *et. al.*, Phys. Rev. B **54**, 8743 (1996).

[6] Lixin He, Gabriel Bester, and Alex Zunger, Phys. Rev. B **72**, 081311(R) (2005).
Lixin He, Gabriel Bester, Phys. Rev. B **72**, 195307 (2005).

[7] G. Bastard, Phys. Rev. B **24**, 4714 (1981).

[8] J. L. Zhu, Phys. Rev. B **39**, 8780 (1989).
J. L. Zhu, J. J. Xong, and B. L. Gu, Phys. Rev. B **41**, 6001 (1990).

[9] F. J. Riveiro and A. Latge, Phys. Rev. B **50**, 4913 (1994).

[10] I. D. Mikhailov, J.H. Marin and F. Garcia, Phys.stat. sol. (b)**242**, 1636 (2005).
I. D. Mikhailov, J.H. Marin and F. Garcia, Phisica E.**23**, 102-107 (2004).

[11] I. D. Mikhailov and F. J. Betancur,Phys. Rev. B **67**, 115317 (2003).

[12] S. V. Branis, G. Li and K. K. Bajaj, Phys. Rev. B **47**, 15735(1992).

[13] A. Montes, C. A. Duque and Porras Montenegro, J. Phys. Condens. Matter **10**, 5351 (1998).

[14] S. T. Perez-Merchancano and G. E. Marquez, Phys. Satatus Solidi B **212**, 375 (1999); Solid State Commun. **110**, 209 (1999).

[15] F. J. Betancur and I. D. Mikhailov, Phys. Rev. B **51**, 4982 (1995).

[16] J. L. Zhu, J. H. Zhao, and J.J. Xiong, Phys. Rev. B **50**, 1832 (1994).

[17] A. Gonzales and I. Mikhailov, Int. J. Mod. Phys. B

[18] M. El-Said, Physica B **202**, 202 (1994).

[19] F. J. Betancur, I. D. Mikhailov and L. E. Oliveira, J. Phys. D **31**, 3391 (1998).

[20] T. Pang and S. G. Louie, Phys. Rev. Lett. **65**, 1635 (1990); S. G. Louie and T. Pang, in *New Horizon in Low- Dimensional Electron System*, edited by H. Aoki (Kluwer Academic, Dordrecht, 1992), p. 445.

[21] John H. Davis, (*The physics of low-dimensional semiconductors-an introducction*), Cambridge University Press. (1998), p. 206 and 222.

[22] M. Y. J. Tan, N. D. Drummond and R. J. Needs, Phys. Rev. B **71**, 033303 (2005).

[23] M. Grundmann, O. Stier and D. Bimberg, Phys. Rev. B **52**, 11969 (1995).

[24] Wenfang Xie and Punan Sun, J. Phys: Condens. Mater **14**, 7245 (2002).

[25] D. R. Herschbach, J. A. Very and O. Goscinski, *"Dimensional Scaling in Chemical Physics"*, (Kluwer Academic Publishers)